多体系の量子力学

サウレス著
松原武生
米沢富美子訳

物理学叢書
26

吉岡書店

THE QUANTUM MECHANICS OF MANY-BODY SYSTEMS

D. J. THOULESS
Department of Mathematical Physics
University of Birmingham
Birmingham, England

1961

ACADEMIC PRESS New York and London

日本語版への序

1960年にこの書を著してから後に，多体系の理論にいくつかの基本的な発展があった．最も重要な発展は超伝導体中の磁束の量子化の発見であった．この現象は，超流動性液体ヘリウム中の循環（circulation）の量子化と密接に関係していて，超伝導を理解する上に非常に重要であるから，その説明を1964年に出版されたドイツ語版に含ませておいた．同じ版に取入れたもう一つの変更は，核における集団運動の理論について．バーミンガム大学でわれわれがなした仕事を詳しく説明したことである．もっとも，同様な仕事は同じ頃，または以前に他の場所でもなされてはいた．この方向の研究の詳細は G. E. Brown 著 "核モデルの統一理論" の中におさめられている．このような追加を多くの小さな訂正や変更と一しょにこの日本語版の中に含めて頂いた．

過去数年の間に，多体系のさまざまな現象の理解に多くの発展が見られたが，それらを正当に扱うには一冊の新しいしかもずっと大部の書物を書く必要がある．幸いに， W. A. Benjamin の出版物のおかげで， とくにその中の D. Pines 教授編の "Frontiers in Physics" シリーズのおかげで，多くの文献が以前よりずっと楽に利用できるようになった．

最後に，量子統計力学に関するその先駆的な業績で，最初に私の注意をこの分野にひきつけられた松原教授が，この書のほん訳にたずさわって下さったことを本当に光栄に思っていると申し上げたい．

ケンブリッジにて
1964年12月

D. J. Thouless

著 者 序 文

この書は理論物理学で“多体問題”として知られている分野の紹介として書かれたものである．核物理学，原子物理学，金属の電子論，液体 He^3 と He^4 の理論に共通した問題を扱い，そのような問題を解くために最近発展した諸方法を記述した．本書の目的が，これまで発展させられて来た諸方法を羅列して説明するよりも，むしろこの分野の統一的な見方を打出すことにあったので，その結果多くの重要な論文で引用しないものもできた．原子核の理論，電子気体及び液体ヘリウムに重点を置き，固体ヘリウムの分子理論にはふれなかった．読者が非相対論的量子力学と統計力学の原理をよく知っていることは前提とされているが，場の理論の知識や，核物理，固体物理の詳細な知識は要求されていない．

本書の内容は，著者がバーミンガム大学で数理物理学部門の人達にした講義を発展させたものであり，著者は同輩の方々から頂いた助言，激励，批判をうれしく思っている．特に C. E. Brown 教授，L. Castillojo氏，G. V. Chester，V. J. Emery，J. A Evans 各博士，R. E. Peierls 教授．D. R. Tilley氏，J. G. Valatin 博士等の御援助に感謝し，R. F. Peierls 博士と E. Canel 氏には校正を手伝って頂いたことに対しお礼申し上げたい．また本書の大部分を用意させて頂いた，コペンハーゲンの理論物理研究所にも感謝申し上げたい．最後にこの問題への興味を起こさせて下さった H. A. Bethe 教授の恩宜に対してお礼申し上げる．

英国バーミンガムにて
1961年1月

D. J. Thouless

訳　者　序

多体問題は物理学のどの分野でも避けて通ることのできない難問であるが，本書で述べられているような“多体系の量子力学”が，一つの新しい分野のごとく扱われはじめたのは，今から10年程前からであった．その後爆発的な流行があって，多くの研究者がこの分野に参集し，超伝導現象の解決をそのピークとして，幾多の成果を挙げたが，最近ではその成果は物理学の元の各分野に持ち帰られて，それぞれに適した形にねり直されているのが現状のように見受けられる．

ここに訳出する Thouless の著書は，この種の最初のまとまった成書であり，その後数多くの多体問題に関する文献集や著書が出版されたが，この書は分野全般を統一的に簡潔に概観し，種々の方法を一応網羅して紹介している点で好個の入門書といえる．

訳者達はそれぞれ機会があって本書の著者と面識をもっている．特に訳者の一人松原には，1955年発表した「量子統計力学の新しい方法」という論文を補ってより完全なものにしてくれた Thouless 氏の名は忘れがたかったが，1960年春ウトレヒトにおける多体問題に関する国際会議で，はじめて会ってその若さに驚かされた．また米沢はイギリス留学中，1964年夏マンチェスター大学で著者と話す機会があったが，その際本書の日本語訳出版の計画が進行中であることを伝えたのを覚えていて，われわれが要請する以前に著者自ら日本語版に対する序言と，40ページにおよぶ訂正および追加の原稿を送ってくれた．この追加分も日本語訳の中に加えたので，本書の内容には最近の発展まで入っているはずである．本文中『　』でかこんだ部分がこの追加分である．

昭和40年2月
京都にて

松　原　武　生
米　沢　富美子

目　　次

第V章 低い励起状態

第VI章 統計力学と超伝導理論

第Ⅰ章　序　　論

p. 1 この書物でわれわれが考える多体系は，物理学のいくつかのちがった分野で出くわすもので，ここに述べられるアイデアは，物理学の種々の分科の問題に応用できる．すなわち核物理学，原子物理学，固体物理学，あるいは極低温物理学にわれわれが論じようとするタイプの問題がしばしば現われる．同じタイプの問題が素粒子物理学にも現われるかどうかはそれ程自明でないが，素粒子の研究のために発展させられたアイデアが，多体問題に応用されて来たという事実は，同じ問題がこの分野でも起ることを示している．

われわれは粒子の交換に関する波動関数の対称性あるいは反対称性が，系の性質に重大な影響をもつような，そんな系だけを論ずる．勿論，その性質が量子力学によってのみ説明されるような多体系も他に存在する．例えば，二原子分子の気体などはそのような系である．そんな系では量子論はただ個々の分子の性質を説明するのに必要なだけで，それから先の多体問題は量子力学を参照することなしに解かれる．一方，ここで問題にしようとする系の性質は，多体系の量子論によってのみ理解されるものである．量子効果を理解することと，多体的性質を理解することを，別々の問題と見なすことはできないのである．このような系において最も重要なことは，構成粒子がボーズ粒子であるか，フエルミ粒子であるかということ，言いかえると波動関数が対称的であるか反対称的であるかということである．

この種類の系の一番よい例は，液体ヘリウムの二種の同位元素型であろう．両者とも絶対零度まで液体であるらしいが，これは古典力学では説明できない事実である．しかも二種の同位元素の性質には，それらの質量のちがいか
p. 2 ら予想されるよりはるかに大きな著しい差が見られる．液体 He^4 は 2.2°K 以下で超流体で，細い管の中を見かけ上粘性がないかのように流れるが，一

方液体 He^3 は0.1°K までであるいはそれ以下でも通常の液体と同様な振舞いをする．このちがいが起るのは，He^4 の原子はボーズ粒子であるのに反して，He^3 の原子はフェルミ粒子であるという事実によることは殆んど確実である．

液体 He^3 の他にも，波動関数の反対称性によって性質が強く影響されている多フェルミ粒子系 (Many-Fermion system) の例がいくつか存在する．原子内の電子もフェルミ粒子であるが，原子構造の理論については，簡単にふれるだけのことにとどめる．原子や分子の性質は，他の多フェルミ粒子系の性質と余り似ていないが，それは電子に比べてはるかに重い原子核がその構造に大きい効果を与えているからである．原子核もフェルミ粒子――陽子と中性子――から成っており，核理論に用いられるアイデアのいくつかは原子論から借りたものがある．ある種の核はボーズ粒子である α 粒子から成っていると見なすことができるが，多くの理由によりこの見地は不満足で余り役に立たない．金属中の価電子もフェルミ粒子でプラズマを作り出すことができ，その性質はパウリの排他律によって大きく左右される．この他にもう一つ，重力で凝集した中性子の球という仮想的な系もあるが，これについては本書ではふれないことにする．†

有限質量をもったボーズ粒子系で量子効果をあらわすものは He^4 の他には例がないが，有限温度で，質量零のボーズ粒子を含む系の例は沢山ある．系がどんな分子から構成されていようとそれに関係なく，殆んどすべての系にフォノンが存在する．スピン波は強磁性および反強磁性物質に存在する．極低温にある多フェルミ粒子系に“零音波”の量子が存在するはずであると考えられている．

そのような系の詳細な理論を作ろうとする試みは，一見無謀に思われるかも知れない．第一に，三粒子系の量子力学すらよく理解されておらず，その見かけ上の簡単さにもかかわらず，ぼう大な計算なしではどんな結果も引出

† L. Landau & E. Lifshitz, “Statistical Physics” (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1958) pp340-343

せないのである．第二に古典的な気体や固体の定性的な性質についてはよく知られているけれども，液体の理論は非常に難しく，その性質は完全にわかっているとはいえない．ところが実は，先に挙げた系はどれも確かに固体ではなく，また気体のように十分小さい密度ももたないから，そのような系の理論は古典液体の理論にもまして難しいはずである．労多い計算をやっても，
p. 3
断片的であまり確かでない結果しか出せないと考えられる．これはある意味で本当であるが，暗い面ばかりでなく明るい面もあるから，その明るい面に注目することにしよう．

原子内の電子を独立粒子とみなすのがよい近似であることは以前から知られていた．すなわち自分以外の電子の平均の位置と，原子核とによってきまるあるポテンシャルの中を，電子が動くと考えるのである．この近似が有用である理由が二つある．その一つは，クーロン・ポテンシャルが長距離に及ぶので，ある点のポテンシャルは特定の一つの電子の位置によって大きく影響されないということである．言いかえると，ポテンシャルは特定の電子の位置よりも，原子全体の状態できまるのである．もう一つの理由は排他律によって生ずる粒子間の相関の方が，電子間の反撥力による相関よりも重要なことである．同じ理由によって，金属内の価電子を，イオンおよび他の電子の平均の効果で作られるポテンシャル中を互に独立に動き，しかもお互どうし区別のつかない粒子として扱うことができる．いずれの系でも，これらは第一近似に過ぎず，系の詳細な性質を説明するためには，電子間の相関を考慮しなければならない．系の波動関数を一粒子波動関数の反対称化した積で近似するこの方法は独立粒子模型と呼ばれる．

理論的見地からすれば，原子核内の核子がこれと同じように振舞うとは期待されなかった．核子間の力は強く，しかもその力の及ぶ範囲は核内の核子間平均最短距離と同程度だからである．むしろ核は原子よりは普通の液滴に似ているものと期待されていた．したがって液滴模型で説明できないような多くの事実を説明するのに，殻模型とか光学模型が成功したことは，驚くべきことであった．その上，核子間のポテンシャルが分子間のポテンシャルと

同様に，近距離で非常に強い反撥力であることが見出されるに至って，事情は一そう不可思議なことになった．多体問題に関する最近の仕事の多くは，どうして独立粒子模型がそんなにうまくゆくのか，その理由を理解しようとする方向にむけられて来た．

この問題に対する答をわれわれが知っているというと少し言葉が過ぎるだろう．しかし少くとも，事情が以前ほどには謎めいていないことは確かである．独立粒子模型を正当化するのに大きい役割を果しているのは，明らかに排他律である，他の区別のつかない粒子が存在しない場合にはおこるはずの核子一核子散乱過程の多くが，排他律によりさまたげられる．またわれわれが模型の中で“独立粒子”と呼んでいるものは，必ずしも本当の粒子である必要はなく，自分の周りの核物質の“ひずみ”にかこまれた核子（これは準
p. 4
粒子と呼ばれる）であってもよい．この考え方は場の理論から借りられたものである．場の理論における物理的粒子は，場の演算子に直接結びついている裸の粒子とはけっして同じものでなく，各物理的粒子は裸の粒子とそれをとり囲む真空の分極とから成っている．素粒子論でいう物理的真空は，仮想粒子がその中に存在するので多体系の特別の例と考えることができる．裸の粒子が多体問題の物理的粒子に対応し，場の理論の物理的粒子は多体問題の準粒子に対応する．こういう考え方のもう少しわかりやすい例が電解質の理論に出てくる．測定される易動度の荷い手であるイオンは，単なるイオンでなく，その周りにゆるく結ばれた水分子を伴っている．イオンとそれにくっついている分子を準粒子と見なすことができる．この考え方は液体 He^3 の理論に対してもかなり有効であった．

ある特定の系に対して独立粒子模型がどのように正当化されるかと云う問題，どんな条件の下でこの模型が系をよく記述するのかという問題，およびこの模型に対する補正がどのようになされるかという問題に答えることは容易でない．これらの問題に関する研究のほとんどが摂動論を使っているが，後にも詳しく述べるように多くの理由で摂動論を使うことは不満足である．主な困難は摂動級数の高次の項が複雑すぎて，最初の数項しか計算できない

ことである．級数の収束あるいはその収束の速さについて，いろいろ推論されているが，いずれも信頼するに足る根拠が殆んどないので非常に不確かである．われわれの考えている問題では，級数の相続く比はせいぜい10：1で，量子電磁力学においてこの比が100：1であることを考え合わせると，上に述べた不確かさは一そう増大する．

級数の第二項が第一項よりずっと大きいとしても，それは必ずしも最初の近似が悪いことを意味しないで，展開のパラメータの選び方が悪かったためかも知れない．例えば近距離で強い反撥力がある場合には，ポテンシャルのべきによる展開は非常に大きい項をもつが，散乱半径のべきに展開すると，級数の最初の項はかなり小さくなる．われわれの議論する問題の多くはこの種の問題に関連している．摂動論の大きな利点は，系統的な計算方法を提供するところにあるが，このようにして得られた結果の意味は決して明白ではない．

分散公式を応用することは，この分野ではその範囲が限られているが，そ
p. 5
れでもいくつかの面白い結果をもたらした．例えば独立粒子模型の仮定と分散公式を結び合わせると，一見自明でない他の結論が引き出される．大きい核についての実験結果から（分散公式を用いて）核子 — 核子ポテンシャルの性質を導くことも可能である．分散公式は特定の興味ある問題に解答を与えてくれるとは限らないが，それが適用できるときには厳密な答を与えてくれることがある．

別の進み方は，古典物理学または巨視的物理学の知識を使って，独立粒子模型の明らかな欠点のいくつかを補正することである．独立粒子模型は当然成り立たなければならない保存則のいくつかを無視している．またある種の簡単な“集団”励起状態は独立粒子模型で記述するとかなり複雑になる．しかし一方では，独立粒子模型に注目し，同時に正しいことがわかっている結果から目をはなさなければ，これらの欠点を補うことは困難でない．このような考え方で予期される結果に対するいくつかの興味ある修正がなされた．詳細な定量的計算よりはむしろこのような定性的結論の方が多体系の物理学の最も重要な成果なのである．

以上のようなアイデアは本書の第二，三，四，および五章で発展させ，上に述べた方法が核構造の問題や絶対零度の液体 He^3 に応用される．原子構造にもある程度適用される．有限温度で熱平衡にある系にも，同じ考え方が少し修正するだけで使えることを，続く三章で示す．この場合には，得られる表式は余分の変数（温度のことであるが）のゆえに少しばかり複雑であるが，原則的な相違はない．ついでこれらの方法を電子ガスの理論にも応用する．ここで導入される唯一の新しい考え方は，準粒子が“粒子”と“空孔”の組合せであるということで，これは最近の超伝導理論の基礎をなしている．同じ考え方は核構造理論においても重要であり，また He^3 にも応用できる．上に述べた新しい考え方を別にすれば，この三つの章を設けたのは前の四つの章で導入されたアイデアをもつと完全に説明するためである．

最後の章で多ボーズ粒子系の性質についての簡単な議論が与えられている．多フェルミ粒子系に使われた方法の殆んどが，少し修正を加えるだけで，多ボーズ粒子系の問題にも応用される．二つの系では形式は非常に似ているが，物理的な解釈はかなり異っている．多フェルミ粒子系と多ボーズ粒子系の類
p. 6 似の基礎になっているのは，共に準粒子が存在することであるが，その存在理由そのものはそれぞれちがっている．液体 He^4 のような系では，粒子のある有限部分が零運動量状態に凝縮している．この状態にある粒子はお互に散乱し合い，反対の運動量をもつものどうしで対を作っている．ある運動量をもった準粒子を作るには，その運動量の状態に粒子を一つ置くか，あるいはそれと反対の運動量をもつ粒子を一つ取除くかすればよい．したがってこの時の準粒子は超伝導理論の場合と同じく粒子と空孔の組合せである．準粒子を安定化し，この近似を有用なものにしているのは，零運動量状態に凝縮している粒子である．

一番低いエネルギーに対応する波動関数は（必ず）対称的でなければならないから，ボーズ粒子系の（基底状態の）特性が波動関数の対称性によって支配されているというのはいくぶんまぎらわしい．He^4 の性質に強い影響を与えているのはむしろ粒子の波動性なのである．これに反し低い励起状態

の性質は対称性の要求に支配されている．なぜなら低い励起状態の多くは対称性のために許されないからである．

本書で扱う話題の殆んどは Les Houches における1958年度の夏の学校の講義ノートでもっと詳しく述べられている．また問題のいくつかの分科における最近の発展については Utrecht における多体問題に関する 1960 年度国際会議で議論され雑誌 Physica の Supplement に収録されている．

以下の各章の終りでしばしば，上記の Les Houghes における講義ノートに現われる文献を引用する．それで単に "The Many-Body Problem" と書いたらこの講義ノートを指すものとする．

第Ⅱ章　解き得る模型

1．緒　　論

p. 7

物理的に興味のある多体問題の多くは非常に複雑である．できることなら数学的に扱いやすく，しかも元の問題に十分似ていて，その性質が系の物理的性質に近いと期待できるような模型を作りたい．しかし，これは多体問題では普通不可能であって，われわれがせいぜい作れる模型は元の問題と重要な点で異なっており，また数学的厳密さを欠いた近似法でしか解けないものである．このことは量子論的問題でも古典論的問題でも同じである．そこで厳密に解ける数少い模型のいくつかをよく調べることが重要になって来る．たとえ模型と実際の物理学系との関係が大変うすいとしても，そのような模型は多体問題のある一般的な様相を示しており，また見出された性質がその模型に固有のものであって，まちがった近似から生じたものでないことは確実だからである．

この章では厳密に扱える二種の多体系を考え，第三の種類のものを第Ⅵ章で考えることにする．第一のものは相互作用のない粒子の系である．これはつまらぬ模型のように見えるが，たいていの多粒子系の理論の出発点として用いられる．金属の理論では，しばしば価電子間の相互作用を考慮することは不必要であり，普通は不可能でもある．原子核の殻模型では，最も単純な形をとっても核子間の相互作用を考えずに，核エネルギー準位の大勢の多くを説明できる．

第二のものは，調和力で作用し合っている粒子の系である．これは古典力学でよく知られた問題で，古典的な解がそのまま量子力学的問題の解を与え

る．この模型は，対象にしている物理系とは非常にちがった性質を持つが，殻模型の欠点のいくつかを明らかにするために，核物理学者が用いてきたものである．

2．相互作用のないフェルミ粒子とボーズ粒子

p. 8

相互作用のない多粒子の系に対するハミルトニアンは，個々の粒子に対するハミルトニアンの和であるから，個々の粒子の固有関数の積が，全ハミルトニアンの固有関数になり，固有値は個々の固有値の和になる．もし粒子が互に区別できないならば，一般に高度の縮退が現われるが，この縮退は，波動関数が粒子の置換に対して，対称的または反対称的でなければならないという条件で，一部分除かれる．ボーズ粒子ならば，波動関数は対称化されていて

$$\Psi(r_1, r_2,\cdots, r_N)=\sum_P \psi_{a1}(r_1)\psi_{a2}(r_2)\cdots\psi_{aN}(r_N) \tag{2.1}$$

に等しい．$\psi_{ai}(r_j)$ は，一粒子ハミルトニアンの固有値 ϵ_{ai} に属する固有関数で，和は添字 a_i のすべての置換についてとる．N 個のフェルミ粒子に対する波動関数は

$$\Psi(r_1, r_2,\cdots,r_N)=(N!)^{-1/2}\det\psi a_i(r_j) \tag{2.2}$$

である．添字 i と j は，1 から N までとる．これらの波動関数は，ともに固有値

$$E=\sum_{i=1}^{N}\epsilon_{ai} \tag{2.3}$$

を持つ．ここで (2.1) は規格化されていないが，(2.2) は，すべての ψ_{ai} が互に直交している時，1 に規格化されている．混乱がおきるおそれがある場合には，一粒子状態 ψ を**準位**，N-粒子状態 (2.1) または (2.2) を**配置**と呼んで区別する．

相互作用している N 個の粒子の系を問題にするときには，一粒子波動関数の完全系を用意して，全系の波動関数を，(2.1) または (2.2) の形の波動関数の一次結合に書くことができる．たとえ相互作用が無視できる場合で

も，ある種の不変性の原理を満足させるために，縮退した配置の一次結合をとる必要がおきる．この最もよい例は核物理学や原子物理学で現われる．そこではハミルトニアンが回転に対して不変であり，したがって一粒子波動関数が角運動量の固有関数であっても，そのような波動関数から作られる行列式は，一般に角運動量の固有関数ではない．適当な一次結合を作る有力な方法が発展させられているが，得られた表式は多くの場合非常に複雑である[†]．

p. 9
二個ないし三個のフェルミ粒子から成る系の波動関数を，行列式の組合わせで表わすことは，屢々便利であり，この記法は原子，分子，あるいは核物理学で，少数の粒子が重要な役割を演ずるときに，よく用いられる．数多くの粒子が，強く関連してくる問題では，それは大変面倒な記述のしかたになるので，一般に，次節に述べる〝第二量子化〟を用いて，この煩雑さを避けている．行列式の組合わせを避けるもう一つの方法は，〝密度行列〟を用いるもので，これによって一つの系の完全な記述をすることができる．この密度行列の一般的な表式は Löwdin (1955) によって与えられている．

3. 第二量子化

エネルギー固有値 ϵ_i をもった一粒子波動関数 ψ_i が完全系を作るとき，それらから作られる $N\times N$ の行列式は N-フェルミ粒子系に対する完全系になり，一般に，これらを表示の基底に選ぶことができる．特定の行列式は，±1 の因子は別として，行列式中にどの ψ_i が含まれるかを言えばきまる．関数 ψ_i が含まれていればその準位は**占められている** (occupied) といい，含まれていない場合には**空いている** (unoccupied) と呼ぶ．±1 の因子は準位の完全系に，一定の順序をつけるときまる．行列式の行を追って，占められた準位が，正しい順序に現われるとき，行列式に＋の符号をつける．

われわれが扱う大抵の演算子は，上に述べた表示で簡単な形を持っている．

[†] L. Landau & E. Lifshitz, "Quantum Mechanics", Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1958. pp. 78–106 参照

例えば，ハミルトニアン H_0 は対角線的で，(2.3) で与えられる行列成分を持っている．したがって，それは行列成分の代りに，数値 ϵ_i の組で完全にきめられる．また，N粒子系のハミルトニアンと，別の数の粒子系のハミルトニアンとが密接に関係していることは，ともに同じ一粒子エネルギーの組で定義されていることから明らかである．同様に運動量演算子

$$P_x=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x_1}+\frac{\partial}{\partial x_2}+\cdots+\frac{\partial}{\partial x_N}\right) \tag{2.4}$$

や角運動量演算子

$$L_x=-i\hbar\left(y_1\frac{\partial}{\partial z_1}-z_1\frac{\partial}{\partial y_1}+y_2\frac{\partial}{\partial z_2}-\cdots+y_N\frac{\partial}{\partial z_N}-z_N\frac{\partial}{\partial y_N}\right) \tag{2.5}$$

も一粒子エネルギーの組で決められる．これは**一粒子演算子**と呼ばれるこの種の演算子の行列成分が，一粒子の空間内の行列（一般には非対角線的）で完全に決定されるからである．

多くの重要な演算子は，**二粒子演算子**で，二粒子が張る空間内の行列で定
p. 10 義される．その一例は，クーロン相互作用で，電荷 e をもつ N 個の粒子系に対して，次の形を持つ．

$$V=\sum_{i=1}^{N-1}\sum_{j=i+1}^{N}e^2[(x_i-x_j)^2+(y_i-y_j)^2+(z_i-z_j)^2]^{-1/2} \tag{2.6}$$

三個以上で張られる粒子の空間で定義しなければならない演算子は，普通必要でない．

第二量子化は，これらの演算子を，一粒子或いは二粒子空間の行列と，多粒子空間で定義された演算子の積で表わす一つの記号である．唯一の必要な演算子は，発生および消滅演算子である．**消滅演算子** a_i は，多粒子空間で次の場合だけ行列成分 ±1 をもっている．それは演算子の右側にくる配置（これを初期状態と呼ぶ）を表わす行列式が（占められた）準位 i を含み，一方左側にくる配置（終状態と呼ぶ）を表わす行列式は，初期状態の行列式に比べて，準位 ψ_i を含む行と，列のうちどれか一つが欠けているものである．負の符号をとるのは，ψ_i が初期状態の行列式の二番目，四番目とどこか偶数番目の行にあるとき，正の符号をとるのは，奇数番目の行にあるとき

である．その他のすべての行列成分は0である．例えば演算子 a_2 のいくつかの行列成分をかくと，次のようになる．

$$\left(\psi_1(r_1\sigma_1),\ a_2\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \psi_1(r_1\sigma_1) & \psi_1(r_2\sigma_2) \\ \psi_2(r_1\sigma_1) & \psi_2(r_2\sigma_2) \end{vmatrix}\right)=-1,$$

$$\left(\psi_3(r_1\sigma_1),\ a_2\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \psi_2(r_1\sigma_1) & \psi_2(r_2\sigma_2) \\ \psi_3(r_1\sigma_1) & \psi_3(r_2\sigma_2) \end{vmatrix}\right)=+1$$

$$\left(\psi_2(r_1\sigma_1),\ a_2\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \psi_1(r_1\sigma_1) & \psi_1(r_2\sigma_2) \\ \psi_2(r_1\sigma_1) & \psi_2(r_2\sigma_2) \end{vmatrix}\right)=0 \qquad (2.7)$$

発生演算子　$a_i^\dagger$ は，a_i のエルミット共役で，終状態が初期状態より一粒子余分に含むときだけ0でない行列成分を持っている．N個の異なった発生演算子の積を真空（粒子が一つも存在しない状態）にはたらかせると，N粒子の行列式ができる．

この定義から帰結として，演算子

$$n_i=a_i^\dagger\ a_i \qquad (2.8)$$

は対角線的で，準位 i が占められている配置間の行列成分は1，それ以外は
p. 11
0である．したがって演算子 n_i は準位 i の**粒子数演算子**と呼ばれる．積 a_i $a_i^\dagger$ も対角線的であるが，その行列成分は準位 i が空いているような配置に対して1に等しいから，$1-n_i$ に等しくなければならない．一般に，フェルミ粒子に子に対する発生，ならびに消滅演算子は，次の反交換関係を満足することが示される．

$$\{a_i,\ a_j\}\equiv a_ia_j+a_ja_i=0=\{a_i^\dagger a_j^\dagger\}, \qquad (2.9)$$

$$\{a_i,\ a_j^\dagger\}=\delta_{ij}.$$

これらの関係式から，$n_i^2=n_i$ であること，したがって準位 i を占める粒子数演算子は，固有値1と0をもつことが証明される．

もし一粒子演算子が，行列成分

$$\langle\psi_i|f|\psi_j\rangle=f_{ij}$$

をもつならば多粒子空間で，それは

$$f=\sum_i\sum_j f_{ij}a^\dagger{}_ia_j \qquad (2.10)$$

となる．これは行列成分を比較して見ればわかる．二粒子演算子は

$$f=\sum_i\sum_j\sum_k\sum_l f_{ij,kl}a^\dagger{}_j a^\dagger{}_i a_k a_l \tag{2.11}$$

の形を持っている．ここで行列成分$f_{ij,kl}$は，二粒子波動関数$\psi_i^*(r_1)\psi_j^*(r_2)$および $\psi_k(r_1)\psi_l(r_2)$ を反対称化しないで計算した成分である．

非常に有用な形の演算子は

$$\psi(\mathbf{r},\sigma)=\sum_i \psi_i(\mathbf{r},\sigma)a_i \tag{2.12}$$

である．これは点 $\mathbf{r}$ にあり，z 軸方向のスピン成分 σ をもった粒子を消滅させるものである．そのような演算子は，反交換関係をみたす．

$$\{\psi(\mathbf{r},\sigma'),\ \psi(\mathbf{r}',\sigma')\}=\{\psi^\dagger(\mathbf{r},\sigma),\ \psi^\dagger(\mathbf{r}',\sigma')\}=0,$$

$$\{\psi(\mathbf{r},\sigma),\ \psi^\dagger(\mathbf{r}',\sigma')\}=\sum_i\sum_j\psi_i(\mathbf{r},\sigma)\psi_j^*(\mathbf{r}',\sigma')\{a_i,\ a^\dagger{}_j\}$$

$$=\sum_i\psi_i(\mathbf{r},\sigma)\psi_i^*(\mathbf{r},\sigma)$$

$$=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta_{\sigma,\sigma'} \tag{2.13}$$

質量 M の自由粒子に対して，基底になる波動関数は週期的境界条件を用いると

$$\psi_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r},\sigma')=\mathcal{V}^{-1/2}\ \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\delta_{\sigma\sigma'} \tag{2.14}$$

で与えられる．ここで $\mathcal{V}$ は系の体積である．このとき，ハミルトニアンは次のように書かれる．

$$H_0=\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\sigma}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2M}\right)a^\dagger{}_{\mathbf{k},\sigma}a_{\mathbf{k},\sigma} \tag{2.15}$$

荷電粒子系に対するクーロン・ポテンシャルは，(2.6)，(2.11)，(2.12)，および (2.14) を使って

$$V=\frac{1}{2}\sum_{\sigma_1}\sum_{\sigma_2}\iint\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\ \psi^\dagger(\mathbf{r}_2,\sigma_2)\psi^\dagger(\mathbf{r}_1,\sigma_1)\psi(\mathbf{r}_1,\sigma_1)\psi(\mathbf{r}_2,\sigma_2)d^3r_1d^3r_2$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{\sigma_1}\sum_{\sigma_2}\sum_{\mathbf{k}_1}\sum_{\mathbf{k}_2}\sum_{\mathbf{q}}\mathcal{V}^{-1}\left(\frac{4\pi e^2}{q^2}\right)a^\dagger{}_{\mathbf{k}_1+\mathbf{q},\sigma_1}\,a^\dagger{}_{\mathbf{k}_2-\mathbf{q},\sigma_2}\,a_{\mathbf{k}_2,\sigma_2}\,a_{\mathbf{k}_1,\sigma_1} \tag{2.16}$$

非常に大きい体積の極限で，運動量 $\mathbf{k}$ についての和は，積分$\mathcal{V}(2\sigma)^{-3}\int d^3k$でおきかえられる．

同様な扱いをボーズ粒子系にもすることができる†．

† L. Landau & E. Lifshitz, "Quantum Mechanics", Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1958. pp. 215–221 参照

消滅演算子 b_i が零でないのは，次の場合だけである．すなわち，初期状態と終状態で準位 i の粒子数がひとつだけ異なり，初期状態に N_i 個，終状態に N_i-1 個含まれる時である．この時行列成分は N_i に等しい．

発生演算子 $b_i^\dagger$ は，b_i のエルミット共役である．準位 i を占める粒子数演算子は $b^\dagger{}_i b_i$ で，波動関数の積で表示したとき対角線的である．演算子は次の交換関係を満足する．

$$[b_i, b_j]\equiv b_ib_j-b_jb_i=0=[b^\dagger{}_i, b^\dagger{}_j],$$
$$[b_i, b^\dagger{}_j]=\delta_{ij} \tag{2.17}$$

4．密 度 行 列

『密度行列は同種のフェルミ粒子からなる系を記述するもう一つの有用な道具である．この書で用いる密度行列は，Dirac (1930) によって導入され，Löwdin (1955) によって拡張された形のもので，Landau と Von Neumann によって導入されたより一般な形の密度行列と混同してはならない．N 個の同種の粒子からなる系が，規格化された波動関数 Ψ によって記述される状態にあるとき，一粒子密度行列は

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')=N\int d^3r_2\int d^3r_3\cdots\int d^3r_N\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\cdots\mathbf{r}_N)\Psi^*(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3\cdots\mathbf{r}_N) \tag{2.18}$$

で与えられる．粒子がスピンをもつときは，座標は位置とスピンの両方を含むものと解釈し，座標についての積分の中には，スピンについての和も含ませなければならない．$\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ を入れかえると複素共役な関数が得られるから，ρ はエルミット行列であることは明らかである．対角成分は $\mathbf{r}$ における粒子の平均密度を与え，行列の跡は N に等しい．(2.12) で定義された第二量子化の演算子を用いて

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')=\langle\Psi|\psi^+(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r})|\Psi\rangle \tag{2.19}$$

と書くこともできる．Ψ が一粒子波動関数 ψ_i の i を 1 から N まで取って作った行列式であるとき，特に簡単な形になり，このときは

$$\rho(\mathbf{r}, \mathbf{r}')=\sum_{i=1}^{N}\psi_i(\mathbf{r})\psi_i^*(\mathbf{r}') \tag{2.20}$$

で与えられる．この場合

$$\int\rho(\mathbf{r}\mathbf{r}'')\,\rho(\mathbf{r}''\mathbf{r}')d^3r''=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\psi_i(\mathbf{r})\psi_j^*(\mathbf{r}')\int\psi_i^*(\mathbf{r}'')\psi_j(\mathbf{r}'')d^3r''$$
$$=\sum_{i=1}^{N}\psi_i(\mathbf{r})\psi_i^*(\mathbf{r}').$$
$$=\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}') \tag{2.21}$$

なる性質があり，したがって $\rho^2=\rho$ である．これは波動関数が唯一つの行列式であるための必要且充分条件であることが示される．ρ はエルミットであるから，対角化することができ，その対角成分は Ψ が唯一つの行列式ならば1か0であるが，唯一つの行列式でないときは，0と1の間の値であり得る．

この一粒子密度行列は，任意の一粒子演算子の期待値を計算するのに用いることができるが，もっと複雑な演算子の期待値を計算するには拡張が必要である．二粒子密度行列は

$$\Gamma(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1'\mathbf{r}_2')=\frac{1}{2}N(N-1)\int d^3r_3\cdots$$
$$\int d^3r_N\Psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3\cdots\mathbf{r}_N)\Psi^*(\mathbf{r}_1',\mathbf{r}_2',\mathbf{r}_3\cdots\mathbf{r}_N)$$
$$=\frac{1}{2}\langle\Psi|\psi^+(\mathbf{r}_2')\psi^+(\mathbf{r}_1')\psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2)|\Psi\rangle \tag{2.22}$$

で定義される．この行列は $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ および $\mathbf{r}_1'$ と $\mathbf{r}_2'$ の入れ替えに対して反対称的で，また $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ を $\mathbf{r}_1'$ と $\mathbf{r}_2'$ でおきかえると複素共役が得られるからエルミットである．それは一粒子密度行列と次の関係で結ばれている．

$$\int\Gamma(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1'\mathbf{r}_2)d^3r_2=\frac{1}{2}(N-1)\rho(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_1') \tag{2.23}$$

高次の密度行列も同様に定義される．もし波動関数が唯一つの行列式であると，高次の密度行列はすべて一粒子密度行列によってきめられ，例えば次のようになる．

$$\Gamma(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1'\mathbf{r}_2')=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}[\psi_i(\mathbf{r}_1)\psi_j(\mathbf{r}_2)\psi_i^*(\mathbf{r}_1')\psi_j^*(\mathbf{r}_2')$$
$$-\psi_i(\mathbf{r}_1)\psi_j(\mathbf{r}_2)\psi_j^*(\mathbf{r}_1')\psi_i^*(\mathbf{r}_2')]$$
$$=\frac{1}{2}[\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}_1')\rho(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_2')-\rho(\mathbf{r}_1\,\mathbf{r}_2')\rho(\mathbf{r}_2\,\mathbf{r}_1')] \tag{2.24}$$

二粒子相互作用のある系に対しては，一粒子密度行列の運動方程式は二粒子密度行列を含んでいる．ハミルトニアンが

$$H=-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2+\frac{1}{2}\sum_i\sum_{j\neq i}V(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_j) \tag{2.25}$$

で与えられるとすると，波動関数は方程式

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=H\Psi \tag{2.26}$$

を満足する．すると密度行列は次の方程式をみたす

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{\partial\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')}{\partial t}&=-\frac{\hbar^2}{2M}N\int d^3r_2\cdots\int d^3r_N[\nabla^2\Psi(\mathbf{r}\mathbf{r}_2\cdots\mathbf{r}_N)\Psi^*(\mathbf{r}'\mathbf{r}_2\cdots\mathbf{r}_N)\\&\quad-\Psi(\mathbf{r}\mathbf{r}_2\cdots\mathbf{r}_N)\nabla'^2\Psi^*(\mathbf{r}'\mathbf{r}_2\cdots\mathbf{r}_N)]+N(N-1)\int d^3r_3\cdots\\&\quad\int d^3r_N[V(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2)-V(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_2)]\Psi(\mathbf{r},\mathbf{r}_2\cdots\mathbf{r}_N)\Psi^*(\mathbf{r}',\mathbf{r}_2\cdots\mathbf{r}_N)\\&=-\frac{\hbar^2}{2M}(\nabla^2-\nabla^2)\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')+2\int d^3r_2[V(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2)-V(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_2)]\Gamma(\mathbf{r}\mathbf{r}_2|\mathbf{r}'\mathbf{r}_2)\end{aligned} \tag{2.27}$$

同様にして，二粒子密度行列に対する運動方程式はまた三粒子密度行列を含み，以下同様にして，連立した方程式の組が得られる．これらの方程式は複雑な物理系に対する近似計算の基礎として用いることができ，そのような一つの応用を第V章10節で述べる．この方式を押進めるのに少し困難がある．というのは，一粒子密度行列の形に対する制限はあるが，二粒子密度行列の性質については，まだ充分明らかにされていないからである．この問題に対する議論は Ayres (1958) によって与えられた．』

5. 調 和 力

平衡位置からの変位に比例した力で相互作用する粒子系の問題は，古典力学では標準的な問題で，一般にある行列を対角線化することによって解くことができる‡．質量 M をもつ，N 個の粒子が，互に区別されず，外部から

‡ H. Goldstein, “Classical Mechanics” Addison-Wesley, Reading. Massachusetts, 950. pp. 318–338 参照

力を受けないで，相互に粒子間の距離に比例する力で作用し合っている時は，とくに簡単な問題になる．このときは，粒子 i にはたらく力は

$$\boldsymbol{F}_i=\sum_{j=1}^{N}K(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_i)$$
$$=KN(\mathbf{r}_0-\mathbf{r}_i) \tag{2.28}$$

となる． $\mathbf{r}_0$ は系の質量中心である．したがって，質量の中心は自由運動をし，個々の粒子は，その周りで振動数 $\sqrt{(NK/M)}$ の調和振動を行なう．三次元の問題では，基準振動のうち，三個は振動数が 0 で，残り $3N-3$ 個は振動数 $\sqrt{(NK/M)}$ をもっている．

p. 13
原理的には，量子力学でもこの問題を解くことができる．質量中心に対する平面波と，他の基準振動の各々に対する適当な調和振子の波動関数の積が，ハミルトニアンの固有関数である†．困難はそのような波動関数が，どんな対称性をもつかが自明でないことである．したがって，調和力で相互作用しているフェルミ粒子の系の，基底状態のエネルギーを見出すというような問題でも，決してつまらぬ問題ではないのである．N個のボーズ粒子の系の基底状態の波動関数は，各基準振動に対する基底波動関数の積に等しく

$$\Psi(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2,\cdots\mathbf{r}_N)=\exp\{(NKM)^{1/2}[\sum_{i=1}^{N}r_i^2-N^{-1}(\sum_{i=1}^{N}\mathbf{r}_i)^2]/\hbar\} \tag{2.29}$$

で与えられる．この状態のエネルギーは

$$E=\frac{1}{2}(3N-3)\hbar(NK/M)^{1/2} \tag{2.30}$$

である．

(2.29) 式からわかるように，粒子数が増すにつれて，粒子が質量中心からはずれる距離平均は $N^{-1/4}$ のように減少する．フェルミ粒子系においても，この平均距離は減少するが，その減少のしかたは $N^{-1/12}$ に比例する．物理学的系でわれわれが主として興味をもつのは，粒子数が増すにつれて，粒子密度が大体一定にとどまるような系（但し原子は例外）であるから，この模型は非常に重要な面で大抵の物理学系と異なっている．しかし，重心運動を分

† L. Landau & E. Lifshitz, "Quantum Mechanics" Addison- Wesley, Reading, Massachusetts, 1958. pp. 64-67 参照

離してしかも波動関数を反対称にとどめおくことの困難さをこの模型はよく示している．この問題を解く方法は Elliott と Skyrme (1955) および Gartenhans と Schwarty (1957) により考え出されている．

『簡単な取扱い方が，Lipkin によって "The Many Body Problem" の中に与えられている．ハミルトニアンは

$$H=-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2+\frac{1}{2}K\sum_i\sum_j(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)^2$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2+\frac{1}{2}NK\sum_i\mathbf{r}_i{}^2-\frac{1}{2}N^2Kr_0^2$$
$$=\frac{p^2}{2MN}+H_{\text{int}} \tag{2.31}$$

の形に書くことができる．ここに $\mathbf{P}$ は

$$\mathbf{P}=-i\hbar\sum_{i=1}^{N}\nabla_i \tag{2.32}$$

で与えられる全運動量で，H_{int} は相対座標のみの関数である．この系と対比するために，強さが NK の調和振子ポテンシャルの中に束縛されている相互作用のないN個の粒子の系，すなわちハミルトニアンが

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{i=1}^{N}\nabla_i^2-\frac{1}{2}NK\sum_i\mathbf{r}_i^2$$
$$=\frac{\mathbf{P}^2}{2MN}+\frac{1}{2}N^2Kr_0^2+H_{\text{int}} \tag{2.33}$$

で与えられる系を考える．H も H_0 も二つの互に可換な部分に分けられ，一つは重心運動に関する部分，他の一つは相対座標に関する部分となる．したがって波動関数も，重心に関する部分と，相対座標の関数 Ψ_{rnt} の積として書きあらわされる．H_0 の固有関数の重心部分は，質量 NM，振動数 $\sqrt{NK/M}$ をもつ振子の波動関数であるのに対して，H の固有関数の重心部分は平面波である．H_0 の基底状態は，粒子を低い準位にできるだけつめることによって得られ，たとえこれが縮退した状態であっても，基底状態の波動関数は最低エネルギー準位にある重心運動の波動関数と，H_{int} の基底状態（または縮退した基底状態のどれか一つ）の波動関数の積でなければならない．Hの基底状態は上の重心波動関数を定数でおきかえて得られる．ある

いは別の言葉でいうと,

$$\exp\left(\frac{1}{2}N\sqrt{NKM}\,r_0^2/\hbar\right)$$

をかければ得られる. なぜかというと, 二つのハミルトニアンは, 相対座標に関しては同じ依存性をもっているからである. H_0 の励起状態はそんなに単純ではない. というのは, 例えば基底状態から一粒子を励起して得られる第一励起状態を考えると, これは H_{int} の励起状態と重心の基底状態を組合わせても, また H_{int} の基底状態と重心の三重に縮退した励起状態を組合わせても得られるからである. したがって, H_0 で記述される独立粒子の励起状態は H の励起状態に対応しないような状態をも含むことがわかる. これらの余分の状態は**にせの状態**と呼ばれる. この問題についてはさらに第V章で議論する.』

第Ⅲ章　変　分　法

1.　ハートリー・フォック方程式

p. 15

量子力学における Schrödinger の変分原理によれば，勝手な波動関数に対するハミルトニアンの期待値は，そのハミルトニアンの最小固有値よりも必ず大きい†．この原理を，一つの系の基底状態をきめるのに用いるには，簡単な試行波動関数の組を用意し，その中からハミルトニアンHの最低の期待値を与えるものを選び出せばよい．もし試行波動関数をうまく選んであれば，最低のエネルギーを与える関数が，基底状態の波動関数に対する有用な近似になるものと期待できる．

N-フェルミ粒子系に対して，一番簡単な試行波動関数は行列式

$$\Phi=(N!)^{1/2}\det\varphi_i(\mathbf{r}_j,\sigma_j) \tag{3.1}$$

である．ここで i と j は，1 から N までかわる．H の期待値が極小になるための必要条件は，それが停留値をとること，すなわち $\delta\Phi^*$ について一次の程度で

$$(\delta\Phi^*, H\Phi)=0 \tag{3.2}$$

となることである．Φ について一次の程度の変化は，(3.1) 式中の φ_i の一つを，$\varphi_i+\eta\varphi_k$ でおきかえることによって作られる．ただし，ここに φ_k は $j\leq N$ なるすべての φ_j に直交する一粒子波動関数で，η は小さい数である．前の章で用いた言葉でいえば，Φ の中の準位 i は占められており，準位 k は空いたものである．新しくつくられた行列式は，η の一次の程度でやはり

† L. Landau & E. Lifshitz, "Quantum Mechanics" Addison-Wesley, Massachusetts, 1958. pp. 55–57 参照

1 に規格化されている．条件 (3.2) は，明らかに Φ と，Φ とはただ一つの行だけで異なる別の行列式との間に H が行列成分を持たないという条件と同等である．

p. 16
第二量子化を用いると，波動関数の変化を次のように書くことができる．

$$\delta|\Phi\rangle=\eta a_k^\dagger a_i|\Phi\rangle. \tag{3.3}$$

ハミルトニアンが，運動エネルギーと，二体の相互作用だけから成るときは，それを

$$H=\sum_i\sum_j T_{ij}a_i^\dagger a_j+\frac{1}{2}\sum_i\sum_j\sum_k\sum_l V_{ij,kl}\,a_j^\dagger a_i^\dagger a_k a_l \tag{3.4}$$

と書ける．ただし，$V_{ij,kl}=V_{ji,lk}$. (3.2) 式の左辺を計算するには，反交換関係 (2.9) を用い，また次のことに注意すればよい．すなわち N あるいはそれより小さい添字をもった発生演算子，およびNより大きい添字をもった消滅演算子を，$|\Phi\rangle$ に左からはたらかせたら 0 になる．こうして条件 (3.2) は

$$T_{ki}+\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}(V_{jk,ji}-V_{jk,ij}-V_{jk,ij}-V_{kj,ji}+V_{kj,ij})=0 \tag{3.5}$$

となる．これはすべての $k>N$, $i\leq N$ に対して成立たなければならない．

ここで，一粒子演算子

$$H^{\mathrm{s.c.}}=\sum_k\sum_i\Big[T_{ki}+\sum_{j=1}^{N}(V_{kj,ij}-V_{kj,ji})\Big]a_k^\dagger a_i \tag{3.6}$$

を定義して，**つじつまの合った** (self-consistent) 一粒子ハミルトニアンと呼ぶ．k と i の値に，制限はついていない．すると (3.5) 式は，$H^{\mathrm{s.c.}}$ が占められた準位と空いている準位の間に行列成分を持たないことを教えている．$H^{\mathrm{s.c.}}$ を対角線的にするような表示に移る方が便利であるが，そうすると占められた準位の一次結合で新しい占められた準位が作られ，また空いた準位から新しい空いた準位が作られることになる．この変換を行っても，$H^{\mathrm{s.c.}}$ の定義は変らない．それは (3.6) 式の j についての和が，占められた準位で張られる部分空間内の対角和になっているからである．新しい表示では，(3.6) から

$$T_{ki}+\sum_{j=1}^{N}(V_{kj,ij}-V_{kj,ji})=\epsilon_i\delta_{ki} \tag{3.7}$$

が得られる．ϵ_i は $H^{\mathrm{S.C.}}$ の固有値である． これが普通の形のハートリー・フォック方程式である．これは，自分以外の粒子との相互作用によって作られるポテンシャル場の中を， 運動する一粒子の Schrödinger の方程式と解釈される．

固有値 ϵ_i は，準位 i の近似的な励起エネルギーと解釈することができ，それらを準位の"**つじつまの合ったエネルギー** (self-consistent energies)"と呼ぶことにする． (3.4) 式と (3.7) 式から， 試行基底状態 $|\Phi\rangle$ における H の期待値は

p. 17

$$E_0=\sum_{i=1}^{N}T_{ii}+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}(V_{ij,ij}-V_{ij,ji})=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(T_{ii}+\epsilon_i) \tag{3.8}$$

となる．もしも，Hの期待値を状態 $a_k^+a_i|\Phi\rangle$，すなわちもともと準位 i にあった粒子を，準位 k に励起したような配置で計算すると

$$\begin{aligned}E_0+T_{kk}-T_{ii}+\sum_{j=1,\neq i}^{N}&(V_{kj,kj}-V_{kj,jk}-V_{ij,ij}+V_{ij,ji})\\&=E_0+\epsilon_k-\epsilon_i-V_{ki,ki}+V_{ki,ik}\end{aligned} \tag{3.9}$$

が得られる．非常に多数の粒子が存在する時には，(3.9) 式の右辺の最後の二項は $1/N$ の程度になり，したがって励起エネルギーは近似的に $\epsilon_k-\epsilon_i$ になる．このことから，明らかなように，$|\Phi\rangle$ が H の期待値の極小を与えるための必要条件は，すべての占められた準位のつじつまの合ったエネルギーが，空いている準位のそれよりも小さいことである．この条件は，(3.9) 式の最後の二項が無視できるときには，たしかに必要条件である．

2. 原子に対するつじつまの合った場

ハートリー・フォック方程式は，原子の構造を計算するのに，とくに有用であることがわかっている．一つの原子内の電子は， 電荷 Ze をもつ固定された原子核との間，およびお互同志の間に静電的相互作用を持っている．電子は，また，スピンをもつから磁気的相互作用も存在するが，それは比較的

小さいから，第一近似では無視できる．ハミルトニアンは，(3.4) 式に示されたような形をもち

$$T_{ij}=-\frac{\hbar^2}{2M}\sum_{\sigma}\int\varphi_i^*(\mathbf{r},\sigma)\nabla^2\varphi_j(\mathbf{r},\sigma)d^3r-Ze^2\sum_{\sigma}\int\varphi_i^*(\mathbf{r},\sigma)\frac{1}{r}\varphi_j(\mathbf{r},\sigma)d^3r,$$

$$V_{ij,kl}=e^2\sum_{\sigma}\sum_{\sigma'}\iint\varphi_i^*(\mathbf{r}_1,\sigma)\varphi_j^*(\mathbf{r}_2\,\sigma')\frac{1}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\varphi_k(\mathbf{r}_1\sigma)\varphi_l(\mathbf{r}_2,\sigma')d^3r_1d^3r_2 \tag{3.10}$$

p. 18
である．つじつまの合った場をきめる方程式 (3.7) は

$$-\hbar^2\nabla^2\varphi_i(\mathbf{r},\sigma)/2M-Ze^2\varphi_i(\mathbf{r},\sigma)/r+e^2\sum_{j=1}^{Z}\sum_{\sigma'}\int\varphi_j^*(\mathbf{r}',\sigma')\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\varphi_j(\mathbf{r}',\sigma')d^3r'\varphi_i(\mathbf{r},\sigma)$$
$$-e^2\sum_{j=1}^{Z}\sum_{\sigma'}\int\varphi_j^*(\mathbf{r}',\sigma')\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\varphi_j(\mathbf{r},\sigma)\varphi_i(\mathbf{r}',\sigma')d^3r'=\epsilon_i\varphi_i(\mathbf{r},\sigma) \tag{3.11}$$

と書ける． (3.11) の左辺第三項の $-e\varphi_i(\mathbf{r},\sigma)$ にかかる因子は，原子内のすべての電子による平均のクーロン・ポテンシャルであって，Hartree (1928) の最初の理論ではこれだけが考慮された．第四項は，φ_i に対する方程式を非局所な形にしてしまっている．これは重要な効果をもち， Fock (1930) によりはじめて導入されたものである．

方程式 (3.11) は，波動関数 φ_i に対する連立非線型方程式であるから，直接解くことは容易でないが，逐次法によって解けることが示されている．つじつまの合ったポテンシャルをまず想定し， そのポテンシャルに対して Schrödinger の方程式を解く．そうして見つかった波動関数を使ってポテンシャルに対する次の近似を計算する．この過程をつじつまの合った答が出るまでくり返すのである． (3.11) 式からわかる一つの特徴は，電子密度が無視できるほど充分核からはなれたところでは，第四項の唯一の効果は，電子とそれ自身のつくる平均ポテンシャルとの相互作用を打消すことである．したがって充分はなれたところでは， ポテンシャル・エネルギーはちょうど $-e^2/r$ となり， 波動関数の漸近的な振舞は， 水素原子に対する波動関数の漸近的振舞と同じになる．この理論を用いて原子波動開数を計算する問題の詳細な議論は Hartree (1957) の著書に与えられている．

3.　トーマス・フェルミの方法

ハートリー近似では，方程式 (3.11) の左辺第四項の交換エネルギーの項は無視されるので，ポテンシャルは位置だけの関数になった．古典的な静電場の理論におけると同様に，ポテンシャル・エネルギー密度は，ハートリー・ポテンシャルと電荷密度の積の半分である．エネルギーへの他のすべての寄与，とくに運動エネルギーの寄与は局所的な粒子密度だけの関数であると仮定する．これはつじつまの合った場がゆるやかに変化するときにだけ，よい近似になり，この変化の波長が，電子の波長に比べてすっと短い時には非常に悪い近似になる．

密度が一様であると仮定して，運動エネルギーの適当な密度依存性を計算
p. 19 することができる．この場合，占められた状態は，すべて平面波であり，その運動量としてはフェルミ運動量と呼ぶ限界値 $\hbar k_F$ までをとる．フェルミ運動量は密度 ρ と

$$\rho=(2\pi)^{-3}\sum_{\sigma}\int^{k_F}d^3k=k_F^3/3\pi^2 \tag{3.12}$$

の関係で結ばれていなければならない．運動エネルギー密度は

$$Ek=3\hbar^2k_F^2\rho/10M=3\hbar^2(3\pi^2)^{2/3}\rho^{5/3}/10M \tag{3.13}$$

であるから，これから運動エネルギーと密度の関係が得られる．

系が平衡状態にあれば，最も高いエネルギーをもつ粒子の全エネルギーは，至るところで，等しくなければならない．さもなくば，粒子をよりエネルギーの浅い所へ移動させることによって，系のエネルギーを下げられるはずだからである．この条件は方程式

$$(3\pi^2)^{2/3}\hbar^2[\rho(\mathbf{r})]^{2/3}/2M-e\varphi(\mathbf{r})=-e\varphi_0 \tag{3.14}$$

を与える．ただし，$\varphi(\mathbf{r})$ は $\mathbf{r}$ におけるポテンシャルである．ポテンシャルに対しては，ポアソンの方程式を用いることができる．

$$\nabla^2\varphi(\mathbf{r})=4\pi e\rho(\mathbf{r})$$
$$=4\pi e(2Me)^{3/2}[\varphi(\mathbf{r})-\varphi_0]^{3/2}/3\pi^2\hbar^3 \tag{3.15}$$

この方程式を解く際の境界条件は，小さい r に対して $\varphi(r)$ が核のポテンシャル Ze/r に近づき，遠い距離では密度の減少のしかたに応じた形をもつことで与えられる．中性原子ならば φ_0 は0で，(3.15) 式で置換

$$\varphi(r)=(Ze/r)\chi(rZ^{1/3}Me^2/\hbar^2) \tag{3.16}$$

を施すと，方程式

$$\chi''(x)=(4/3\pi)x^{-1/2}\chi(x) \tag{3.17}$$

が得られ，境界条件は $\chi(0)=1$ および $\chi(\infty)=0$ となる．したがって，中性原子についてのすべての知識は，この一変数の唯一つの関数の表があればそれから得られる．この無次元の方程式が教えることは，電子数の増加に対して原子の半径は $Z^{-1/3}$ に比例して減少し，エネルギーの方は $Z^{7/3}$ に比例して増加することである．われわれが考える物理系のうちで，原子はエネルギーが系内の粒子の総数に比例しない唯一の例である．

この方法は，原子のエネルギーや大きさが，原子番号とともにどのように変化するか大づかみの様子を与えてくれるが，勿論，詳細な振舞については何も与えない．トーマス・フェルミの方程式の解は，ハートリー・フォック方程式を逐次近似法で解くときの有用な出発点になる．

p. 20

この方法は交換エネルギーを密度の関数として扱い，ρ^2 に比例する形で取入れることによってさらに改良される．運動エネルギーに対する場の非均一さの影響を考慮する試みもあるが，そうする価値があるかどうか疑わしい．この方法の原子構造論への応用についての詳しい議論は Gombás (1949) の著書に与えられている． また方法の総合解説は March (1957) によって与えられている．

4. 核 物 質

原子の密度とエネルギーは，原子番号の増加とともに急激に増すので，原子の性質を，液体 He^3 や，金属内の電子のような フェルミ粒子群の，無限にひろがった系の性質と比較しても役に立たない．一方，核子の無限にひろがった系は存在しないけれども，原子核はひろがった系とある意味で似てい

る．原子核の液滴模型では，原子核を一様な密度をもった中心部と密度が急激に0に近づく表面をもつと考える．

現在では，この模型が原子核のかなり正確な描像になっているという二通りの証拠があり，またやや正確さを欠くけれどもこのことを支持する議論は多数ある．この模型から，原子核のエネルギーに対して次の式がでて来る．

$$E(N, Z) = -a_1A + a_2A^{2/3} + a_3Z^2A^{-1/3} + \frac{1}{4}a_4(N-Z)^2/A \qquad (3.18)$$

この式は Weizsäcker の半経験的質量公式と呼ばれている．ここに Z は陽子の数，N は中性子の数，A は質量数 $N+Z$ である．(Bethe & Bacher, 1936)．第一項は，核の一様な密度から生ずる．粒子の位置が核の表面近くにない限り，周囲からの粒子への効果は粒子の場所とか，核の種類とかに関係なく同じであるから，第一近似で粒子あたりのエネルギーは等しい．第二項は表面エネルギーである．表面面積は $A^{2/3}$ に比例し表面にいる粒子はそれを引きつける隣接粒子が内部より少いために余分のエネルギーをもつと考えられる．これは丁度，液体の表面にいる粒子が余分のエネルギーを持つのと同様である．第三項は，$A^{1/3}$ に比例した半径の球内に一様に分布した電荷によるエネルギーでクーロン・エネルギーである．第四項は，対称エネルギーと呼ばれ，排他律の作用にもとづくエネルギーで古典的液体には類似のないものである．明らかに排他律は陽子と中性子が同数になることを有利にするが，粒子数の差の平方にとったのは便宜上のことで，他にとくによい形がないからである．

(3.18) 式のパラメータは核の結合エネルギーの一般的傾向とよく合うよ
p. 21
うにきめられるが，勿論，個々の場合にはかなり大きな偏差も起る．最近の最も注意深いパラメータの選択は，Green (1958) によってなされた．もっとも他の経験式の方がよりよい一致が得られることもある．主なずれは陽子および中性子が偶数個ある場合を有利する対エネルギーが原因となるもの，および中性子または陽子の閉殻の効果によるものとである．

今では核の大きさに関して，液滴模型から予想される結果のいくつかを確かめる詳細な証拠が存在している．核による高エネルギー電子の散乱は，核

内の電荷分布を明らかにした (Hofstadter, 1956). それによると，電荷密度は中心部で一様で 2.5×10^{-13}cm の距離の範囲で密度の極大値の 0.9 倍から 0.1 倍の値まで低下する．もしも，中性子が陽子と同じ体積に分布しているとすれば，中央部の密度は $\left(\frac{4\pi}{3}r_0^3\right)^{-1}$ に等しく，r_0 は 1.12×10^{-13}cm という値になる．しかしすべての核が球状とは限っていない．

これら二種類の証拠が示していることは，まず核力は**飽和**することである．Z が大きい時利いてくるクーロン力がもしなければ，同数の陽子と中性子の混合が結合して安定な集団を作る．この時の結合エネルギーはAが大きいという極限で粒子の総数に比例する．結合した多数の陽子と中性子のこの仮想的集りが**核物質**と呼ばれているもので，そのような無限にひろがった系が実際に作られるのを不可能にしているのは，陽子間のクーロン反撥力である．仮想的な核物質の性質は実在の核の性質から帰納できるもので，粒子あたりのエネルギーは近似的に (3.18) 式の $-a_1$ になり，a_1 は 15.9 Mev である (Green, 1958).

一般に核物質は非圧縮性であると仮定されているが，質量数を変えても核の中心密度が一定であるという実験事実はこの仮定が正しいことを示している．核の内部には，表面張力による正の圧力と静電的反撥力による負の圧力が作用し，全体として正であるが，それは原子番号が増すとともに減少する．もしも核物質が圧縮性であるならば，中心密度は重い核よりも中位の核に対して大きいはずである．中心密度が一定という観測事実は，圧力の核子密度についての微係数が粒子あたり 15 Mev という値より大きくなければならないことを示している．

密度の変化が大変ゆるやかであることから，核はトーマス・フェルミの方法を適用するのに適した系であろうと想像されるかも知れない．これは Gombäs と協力者によって一連の論文 (1952 a, b, 1955, 1957) で試みられたが，この方法はあまり成功しないことがわかった．クーロン・ポテンシャルに対して用いられたと同じ方法を，湯川ポテンシャルに用いることは可能か

も知れないが，このような単調な局所的ポテンシャルは，飽和を示さない†.
p. 22
飽和を与えることができる交換ポテンシャルを含めると，エネルギーを密度の関数として書下すことは容易であるが，ポテンシャル・エネルギーに対する密度変化の影響をどう扱えばよいかよくわからない. Gombás はこの効果を無視し，密度変化のクーロン・エネルギーおよび運動エネルギーに対する影響だけを考慮した（彼が用いた運動エネルギーの補正は多分正しくない）. 計算された密度は余りにゆるやかに変化し過ぎ，その形はガウス曲線に近い. これは核の表面で急に減少する密度の観測値と非常にちがっている. 表面領域の取扱いを改良する試みが Swiatecki (1951) によってなされているが，彼の方法は運動エネルギーだけを扱い，ポテンシャル・エネルギーは考慮していない. 核表面の性質を計算する問題の批判的な議論は Swiatecki (1957) と Wilets (1958) によって与えられている.

5. 無限にひろがった系に対するハートリー・フオック方程式

核表面の性質を計算する試みは成功していないけれども，核物質の内部のエネルギーや，平衡状態の密度を計算することはずっと簡単な仕事である. 核物質のようなひろがった系に対しては，ハートリー・フオックの方程式は特に簡単な解をもっている. 外場がない時は (3.4) 式の T と V は運動量を保存するので 運動量表示 (2.14) は (3.7) 式の T_{ki} と $V_{kj,ij}$ を対角化する. したがって平面波は，ハートリー・フオックの方程式 (3.7) を満足し，つじつまの合ったエネルギーは

$$\epsilon_i = T_{ii} + \sum_j (V_{ij,ij} - V_{ij,ji}) \tag{3.19}$$

となる. ここに j についての和はフェルミ運動量よりも小さい運動量をもつ，すべての状態についてとる. このように問題は簡単にとけたわけである. 無限にひろがった系に対して，つじつまの合ったエネルギーを見付けるのはや

---

† 飽和の問題については H. A. Bethe & P. Morrison, "Elementary Nuclear Theory" Wiley, New York 1956. pp. 108–118 参照

さしいと上に述べたのはこのことをさしている (Bethe, 1956). もしVが局所的なポテンシャルであると，その行列成分は交換運動量のみに依存し，したがって $V_{ij,ij}$ は定数になり交換ポテンシャルの部分 $V_{ij,ji}$ は i による. したがってハートリー・フオック・ポテンシャルは i に依存し，運動量表示から配位空間の表示にもどると (3.11) と同じようにポテンシャルは非局所的になる. 運動量表示で，対角線的な，局所的一核子ポテンシャルは，単にすべてのエネルギー準位を，同じ量だけずらす.

特定の運動量 $\mathbf{k}$ をもった平面波の状態の 各々には， 中性子および陽子の
p. 23
どちらかが入り，スピンの向きも上向き，下向きの二通り可能である. だから各々の運動量に対して四つの状態が存在し，それらは荷電状態（陽子か中性子）と，スピンの方向（上向きか下向き）を与えることによって区別される. 面倒な表現をさけるために荷電状態や，スピンの向きを陽に書かないで，イタリックの k でもって運動量 $\mathbf{k}$，ならびに特定の荷電状態，およびスピンの向きも含めた状態を表わすことにする. もしスピンおよび荷電依存性がなければ，状態についての和は積分 $4v(2\pi)^{-3}d^3k$ でおきかえられる. v は系の体積で，因子 4 は荷電状態，およびスピンの向きについての和から来たものである.

この記号を用いると，(3.8) 式で与えられる基底状態のエネルギーを

$$E_0=(v/2\pi^3)\int\theta(k_F-k)\left(\frac{\hbar^2k^2}{2M}\right)d^3k$$

$$+\frac{1}{2}(v/2\pi^3)^2\iint\theta(k_F-k)\theta(k_F-k')\langle V_{kk',kk'}-V_{kk',k'k}\rangle d^3kd^3k' \quad (3.20)$$

と書くことができる. $\theta(k_F-k)$ は $k_F>k$ に対して 1, $k_F<k$ に対して 0 となる関数を表わす. 行列成分は，荷電およびスピン状態について平均をとる. ここでは中性子に対しても陽子に対しても，フェルミの 運動量 $\hbar k_F$ は等しいと仮定した. もし対称エネルギー，すなわち (3.18) 式の右辺第四項を計算したいなら，陽子と中性子に対して少し異なるフェルミ運動量をとらなければならない. 密度は

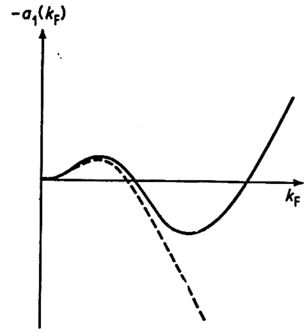
$$\rho=2k_F^3/3\pi^2 \quad (3.21)$$

であるから，粒子あたり平均エネルギーは次式で与えられる．

$$-a_1(k_F)=3\hbar^2k_F^2/10M$$
$$+(3v/16\pi^4k_F^3)\iint\theta(k_F-k)\theta(k_F-k')\langle V_{kk',kk'}-V_{kk',k'k}\rangle d^3kd^3k' . \tag{3.22}$$

前節で述べた電子散乱の実験によると，k_F の実験値は $1.36\times10^{13}\mathrm{cm}^{-1}$ で，従って運動エネルギーは約 23 Mev となり，観測された全エネルギーの値を得るには，ポテンシャル・エネルギーとして粒子あたり -39 Mev をとらなければならない．

核物質のエネルギーと密度を計算するのに，Euler (1937) と Huby (1949) はこの式を用いた．(3.22) 式の中のVとして普通の引力のポテンシャルを使うことはできない．というのは大きい k_F に対する普通の引力ポテンシャルの，(3.22) 式への寄与は負の大きな値であり，平衡密度がなくなってしまうからである．そのようなポテンシャルに対するエネルギーの k_F 依存性を第一図に示した．核力の飽和を説明するのに用いられる交換力は，相対的角運動量およびスピンのある状態に対しては引力になり他の状態に対しては反撥力になる．したがってそのような力に対しては $-a_1(k_F)$ が極小値をもつような平衡密度が存在する．Euler と Huby の計算では，交換力を用いて，平均エネルギーが第一図の実線で示したように k_F に
p. 24
依存することが見出された．曲線の極小の位置は粒子あたりの結合エネルギーと平衡密度を与え，極小での曲率は圧縮率を与える．彼らの計算で用いたポテシャルが核子-核子散乱の低エネルギー領域の実験とよく合う時は，計算された平衡密度も，結合エネルギーも実測値より小さく出る．一方，同じこのポテンシャルでは高エネルギー散乱の実験事実を合わせることができない．それで，次の章でこ



第一図　核物質の粒子あたりのエネルギーをフェルミ運動量 $\hbar k_F$ の関数として示した図．破線は交換力を混じえないポテンシャルから得られたもの，実線は飽和を与えるに充分な交換力を加えたポテンシャルから得られたもの

れらの計算を改良する問題を考えることにする.

6. ハートリー・フォック方程式の別解

第一図の実線で極小をこえた部分を解釈することは容易である. もし粒子に圧力をかけると, 密度は増加し, 示された曲線はこの領域でエネルギーの密度変化に対するもっともな近似である. もし k_F が平均エネルギーを極小にする値よりも小さいと, このような解釈はできなくなる. それは負の圧力を系に加えることができないからである. 事実粒子密度が平衡状態よりも低いときは, 平面波の行列式はもはやハミルトニアンの最低の期待値を与える行列式でなくなる. 全体積を二つの部分に分け, すべての粒子を一方の体積につめこんで平衡密度をもつようにした方が, 低いエネルギーが得られることは明らかである. 体積の別の部分では基底になる波動関数はすべて消えてしまうであろう. すると行列式は何か凝縮した液体のようなものを表わすことになるだろう.

p. 25

平面波でつくった行列式が, ハートリー・フォック方程式の最良の解にならないような明白な例がもうひとつある. 粒子が接近しているとき非常に大きく正であり, 遠くはなれているときは負であるような粒子間ポテンシャルを想像してみよう. この型のポテンシャルは近距離で反撥し合うような分子間にみられるものと同じである. 平面波でつくった行列式では, 粒子の重なりがあるから, ポテンシャル・エネルギーの期待値は非常に大きく正になる. もし重なりのない平面波の行列式を用いたとすれば, 運動エネルギーは増す代りに, ポテンシャル・エネルギーはずっと減少する. 基底の波動関数が互に重ならないようにするには, 各々の波動関数に固有の小さい領域をもたせ, その外側ではその波動函数が 0 になるようにとるとよい. こう仮定することは固体状態にある系を考えることに当るが, そのような系を記述するハートリー・フォック方程式の解を見つけることも, やはり可能なはずである. 『このような可能性についての詳しい議論は Mermin (1962) によって与えられている.』

そのような可能性に対する関心がたかまって来たのは Overhauser (1960) が核物質に対するハートリー・フォックの方程式の最良の解は，密度のゆらぎを伴ったものかも知れないと提唱したからである．彼の論文にはこの考えは充分発展させられていないが，この考えに対してはいくつかの批判がある．核物質に対する最良の解は，二つの中性子と二つの陽子が局在して，格子状に配列した状態を表わすようなものかも知れないということが，アルファ粒子の強い結合力から予想される．しかし中位の，ないし重い核の中にそのようなクラスターが存在しているという実験的証拠は余りない．そのような格子ができていたとしても，それは系が固体であるという意味ではないことを Gross (1960a) は示した．『事情ははっきりしていないが，電子気体に対しては，平面波でつくった行列式がハートリー・フォック方程式の最良の解でないことが Overhauser (1962) によって証明されている．』

ハートリー・フォックの方程式の最良の解がどんなものか予想することは容易でないが，ある特別の解が最良であるための附加条件を見出すことはできる．その条件とはすなわち基底にとる波動関数に無限小の変化を与えても，ハミルトニアンの期待値は減少しないことである．この条件をみたす解は **“安定である”** という．安定の条件はある行列の固有値に対する条件になるが，次にそれを見出そう．まず，行列型の波動関数に対する一般表式を第二量子化の記号を使って書いておくのが便利である．

第二量子化を用いて，(3.1) の波動関数は次のように書かれる．

$$|\Phi\rangle=(\prod_{i=1}^{N}a_i)|0\rangle \tag{3.23}$$

p. 26
ここに $|0\rangle$ は真空，すなわち粒子が一つもない状態を表わす．
一般の N-粒子行列式は

$$|\Phi'\rangle=\{\prod_{\alpha=1}^{N}(\sum_{i=1}^{N}f_{\alpha i}a_i^{+}+\sum_{m=N+1}^{\infty}f_{\alpha m}a_m^{+})\}|0\rangle \tag{3.24}$$

と書くことができる．もしこの状態が $|\Phi\rangle$ に直交していなければそれを

$$\langle\Phi|\Phi'\rangle=\det f_{\alpha i}=1 \tag{3.25}$$

によって規格化することがきる．$N\times N$ 行列 $f_{\alpha i}$ の逆行列を $F_{i\alpha}$ と書けば

$$\sum_{i=1}^{N} f_{\alpha i}F_{i\beta}=\delta_{\alpha\beta}, \qquad \sum_{\alpha=1}^{N} F_{i\alpha}f_{\alpha j}=\delta_{ij} \tag{3.26}$$

そこで $m>N$ に対して

$$C_{mi}=\sum_{\alpha} F_{i\alpha}f_{\alpha m} \tag{3.27}$$

を定義する．行列式 (3.24) の N 個の基底波動関数は

$$\sum_{i=1}^{\infty} f_{\alpha i}a_i^{\dagger}|0\rangle$$

でそれらの N 個の一次結合を

$$\begin{aligned}\sum_{\alpha=1}^{N} F_{j\alpha}\sum_{i=1}^{\infty} f_{\alpha i}a_i^{\dagger}|0\rangle &= (a_j^{\dagger}+\sum_{m=N+1}^{\infty} C_{mj}a_m^{\dagger})|0\rangle \\ &= (1+\sum_{m=N+1}^{\infty} C_{mj}a_m^{\dagger}a_j)a_j^{\dagger}|0\rangle\end{aligned} \tag{3.28}$$

とする．これらから作った行列式は $|\Phi'\rangle$ に等しいから

$$\begin{aligned}|\Phi'\rangle &= \{\prod_{j=1}^{N}(1+\sum_{m=N+1}^{\infty} C_{mj}a_m^{\dagger}a_j)a_j^{\dagger}\}|0\rangle \\ &= \{\prod_{j=1}^{N}\prod_{m=N+1}^{\infty}(1+C_{mj}a_m^{\dagger}a_j)\}|\Phi\rangle \\ &= \{\exp(\sum_{j=1}^{N}\sum_{m=N+1}^{\infty} C_{mj}a_m^{\dagger}a_j)\}|\Phi\rangle\,.\end{aligned} \tag{3.29}$$

ここで反交換関係 (2.9) 即ち $a_j^2=a_m^{\dagger 2}=0$ という性質を用いた．この式は，$|\Phi\rangle$ に直交しない任意の N 粒子行列式を表わし，これを用いて $|\Phi\rangle$ がハミルトニアンの期待値の極小を与える条件を，簡単に見つけることができる．

p. 27 それにはハミルトニアン (3.4) の期待値を C_{mj} について二次の程度まで計算しなければならない．$|\Phi\rangle$ はハートリー・フォック方程式の解であるから，一次の項は存在せず，(3.7) と (3.8) 式を用いて

$$\begin{aligned}\langle\Phi'|\Phi'\rangle &= 1+\sum_{i=1}^{N}\sum_{m=N+1}^{\infty}|C_{mi}|^2\,, \\ \langle\Phi'|H|\Phi'\rangle &= E_0\langle\Phi'|\Phi'\rangle+\sum_{i=1}^{N}\sum_{m=N+1}^{\infty}(\epsilon_m-\epsilon_i)|C_{mi}|^2 \\ &+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\sum_{m=N+1}^{\infty}\sum_{n=N+1}^{\infty}[(V_{in,jm}-V_{in,jm})C_{nj}^{*}C_{mi} \\ &+\frac{1}{2}(V_{ij,mn}-V_{ij,nm})C_{mi}C_{nj}+\frac{1}{2}(V_{mn,ij}-V_{mn,ji})C_{mi}^{*}C_{nj}^{*}]\end{aligned} \tag{3.30}$$

となる．こうして C_{mi} に関する二次形式が得られるが，解が安定であるためには，この二次形式がつねに正か零でなければならない．二次形式の固有値 λ は

$$(\epsilon_m-\epsilon_i)C_{mi}+\sum_{j=1}^{\infty}\sum_{n=N+1}^{N}[(V_{mj,in}-V_{mj,ni})C_{nj}+(V_{mn,ij}-V_{mn,ji})C^*_{nj}]=\lambda C_{mi}$$
$$(\epsilon_m-\epsilon_i)C^*_{mi}+\sum_{j=1}^{N}\sum_{n=N+1}^{\infty}[(V_{ij,mn}-V_{ij,nm})C_{nj}+(V_{in,mj}-V_{in,jm})C^*_{nj}]=\lambda C^*_{mi} \tag{3.31}$$

で与えられ，安定条件はすべての λ が，正か零ということである．この方程式の物理的解釈については，第Ⅴ章10節で議論する．

δ 函数ポテンシャルで相互作用する粒子からなる，無限に大きい系にこの方程式を応用し，平面波でつくった行列式が，ハミルトニアンの期待値を極小にするかどうかを吟味してみよう．簡単のため，ただ一種類の粒子があるとしてそのスピンを½と仮定する．ポテンシャルの行列成分は運動量を保存する．同じ粒子は互に遠ざけ合う排他律の効果のために，反対向きのスピンをもつ粒子間のみに相互作用があり，零でない行列成分は，すべて常数 V/v に等しい．ハートリー・フオックのエネルギーはどれもこの相互作用によって一定値だけずれ，方程式 (3.31) は

p. 28

$$[\hbar^2(2\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}-q^2)/2M-\lambda]\ C(\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma;\ \mathbf{k},\sigma)$$
$$+(V/8\pi^3)\int[C(\mathbf{k}'+\mathbf{q},-\sigma;\mathbf{k}'-\sigma)+C^*(\mathbf{k}',-\mathbf{q},-\sigma;\mathbf{k}',-\sigma)]\,d^3k'=0 \tag{3.32a}$$

とその複素共役式および

$$[\hbar^2(2\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}-q^2)/2M-\lambda]C(\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma;\mathbf{k},-\sigma)$$
$$-(V/8\pi^3)\int[C(\mathbf{k}'+\mathbf{q},\sigma;\mathbf{k}',-\sigma)+C^*(\mathbf{k}'-\mathbf{q},-\sigma;\mathbf{k}',\sigma)]\,d^3k'=0 \tag{3.32b}$$

とその複素共役式となる．ここで，m を運動量 $\mathbf{k}-\mathbf{q}$ と，スピン σ をもつ準位，i を運動量 $\mathbf{k}$ と，スピン σ' をもった準位であるとしたとき，C_{mi} を $C(\mathbf{k}+\mathbf{q},\sigma;\ \mathbf{k},\sigma')$ で表わした．この二つの固有値問題は双方に

$$[\hbar^2(2\mathbf{k}-\mathbf{q}\cdot q^2)/2M-\lambda]^{-1}$$

をかけ $\mathbf{k}$ で積分することによって，解くことができる．二つの方程式から

$$\begin{vmatrix} 1\pm A & \pm A \\ \pm A & 1\pm A \end{vmatrix}=0 \tag{3.33}$$

の形の一つの方程式が得られる．正符号は (3.32a) から生じ，負符号は (3.32b) から生ずる．数値 A は

$$\begin{aligned} A&=\frac{V}{8\pi^3\hbar^3}\int_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|>k_F}^{k<k_F}[\hbar^2(2\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}-q^2)/2M-\lambda]^{-1}d^3k \\ &=\frac{V}{8\pi^3\hbar^3}\int_{|\mathbf{k}-\mathbf{q}|>k_F}^{k<k_F}[\hbar^2(-2\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}-q^2)/2M-\lambda]^{-1}d^3k \end{aligned} \tag{3.34}$$

で与えられる．λ が正という条件は

$$\frac{|V|}{4\pi^3\hbar^3}\int_{|\mathbf{k}+\mathbf{q}|>k_F}^{k<k_F}[\hbar(2\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}-q^2)/2M]^{-1}d^3k\leq 1 \tag{3.35}$$

となる．この不等式の左辺は，q が零に近づくにしたがって，極大値へ近づき，その極限値は $Mk_FV/2\pi^2\hbar^2$ となるから，安定条件は

$$|V|2\leq\pi^2\hbar^2/Mk_F \tag{3.36}$$

である．

p. 29

この結果を簡単に解釈することができる．上向きスピンをもつ粒子の局所密度を n_+，下向きスピンをもつ粒子の局所密度を n_- とすると，エネルギー密度は

$$E(n_+, n_-)=(3\hbar^2/10M)(6\pi^2)^{2/3}(n_+^{5/3}+n_-^{5/3})Vn_+n_- \tag{3.37}$$

である．一様な密度からのずれ δ の空間全体についての積分は零であるとすると，δ の二次の程度で

$$\int E(n+\delta,\, n\pm\delta)\approx\int E(n,\, n)+\left(\frac{\hbar^2(6\pi^2)^{2/3}}{3Mn^{1/3}}\mp V\right)\int\delta^2 \tag{3.38}$$

これに $n=k_F^3/6\pi^2$ とおくと，(3.36) はエネルギーが一様な分布からのわずかなずれに対して，減少しないための条件であることがわかる．V が負の時には，不安定性の原因は，全粒子密度のゆらぎ，すなわち，二種のスピン密度が同方向に変化することから来ている．一方 V が正の時には，不安定性はスピンのゆらぎ，云いかえれば二種のスピン密度が反対の方向に変化することからおこる．

7. Jastrow の方法

多くの問題で，われわれが扱うのは近距離で非常に強く反撥し合うような粒子系である．ポテンシャルが大きくて正である領域を固い芯 (hard core) と呼ぶことにする．ハートリー・フォックの方程式の最良の解は，固い芯が重ならないような局在した波動関数の行列式でなければならない．これは密度が高くて，粒子が稠密につめ込まれているような系に対しては，充分に妥当であり，波動関数は固態を記述していることになる．しかし，系によってはポテンシャルが固い芯をもっていても，流体の基底状態をもつことがある．このような状態が起こるには，芯の半径は粒子間の平均距離に比べて，ずっと小さくなければならない． 液体 He^3 はそのような系の一つであり，核物質もその一例である． これは核子が 0.5×10^{-13}cm より近く接近すると互に強く反撥し合うという証拠があることから言える†． このような場合ハートリー・フォックの解は明らかに悪い近似である．

唯一つの 行列式よりよい波動関数の形が， Jastrow によって 提案された (1955)．試行波動関数は

$$\Phi=f(r_{12})f(r_{13})\cdots f(r_{ij})\cdots\det\Phi_i(r_j) \tag{3.39}$$

で，r_{ij} は粒子 i と j の間の距離である．これは一つの行列式に，粒子の対ごとに一つの因子をかけたもので，この因子は粒子間の距離の関数である．

p. 30

この波動関数は，正しく反対称化されている．$f(r)$を，芯の半径よりも小さい r に対して，消えるようにとると，強い反撥によってポテンシャルエネルギーの期待値が不必要に増加することはなくなりしかも運動エネルギーの方も余り増加しないようにできる．

この方法の困難な点は，ハミルトニアンの期待値に対する陽（あら）わな表式を得ることができないことである．普通に用いられる計算方法は，期待値を “クラスター展開” しその展開のはじめの数項をとるのである．粒子間

† この議論については次を参照 H. A. Bethe & P. Morrison, “Elementary Nuclear Theory” Wiley, New York 1956. pp. 129–131

の距離に比して，芯の半径が小さいときにはこのやり方でよい．この方法に対する解説は Aviles (1958) によって与えられている．またこれは Iwamoto と Yamada (1957) によって核物質の理論に応用され，Dabrowski (1958) によって有限の核の結合エネルギーを計算するのに用いられた．Dabrowski はこの展開が Brueckner 理論を簡単化した形に導くことを示しているので，Brueckner 理論との関連を除いて，これ以上議論しないことにする．

8. 殻 模 型

核物質の理論により，中程度の重さおよび重い核の一般的性質のあるものを研究することができるが，核の殻模型は，実際の核について見出されている性質の多くを詳細に説明することができる．これについては，Mayer と Jensen (1955) の著書に記述されている．核物質と他の無限にひろがった系（液体 He^3，電子ガスなど）との間に密接な関係があり，また計算も核物質の理論の方が殻模型より簡単であるので，われわれはここで核物質の理論の方に重きをおくことにしょう．しかし，どんな詳細な計算をするにしても，殻模型は出発点として用いなければならない．

殻模型では，核子は共通のポテンシャルの井戸の中で独立に運動していると仮定される．この井戸の中を運動する粒子のエネルギー準位は一連の殻に並べられる．これらの殻間には大きなエネルギー差がある．陽子または中性子がある一定数の殻をちょうどつめた時に核の結合エネルギーが大きいという事実があるが，これは殻模型に対する最も著しい支持になっている．そのような核を閉殻核と呼ぶ．

これはハートリー・フォック方程式から与えられる核の描像である．困難は，核子間の力が余りに強くて，ハートリー・フォック方程式が，一つの核の基底状態のよい記述を与えると期待できる理由がない点である．にも拘わらず，有限の大きさの核に対し，ハートリー・フォック流の計算を行い，有用な知識を得る可能性はある．ただしこの時使うポテンシャルは，実際の核子-核子ポテンシャルと必ずしも密接に関係がなくてもよいけれど，核物質

に対しては正しい結果を与えるようなものでなければならない．この種の系統だった計算はまだなされていない．

p. 31

実際に計算をしないでもつじつまの合ったポテンシャルが持たねばならない一般的性質を導くことはできる．核の中央部では，ポテンシャルは，核物質に対するポテンシャル（3.19）式の右辺第二項に似ていなければならない．この項は粒子の位置にはよらないが，運動量に依存する．表面の領域では，ポテンシャルはおそらく非局所的でなければならないが，この領域での他の性質は余り明瞭にされていない．閉殻をもつ核は，球対称であるが，閉殻外にある余分の粒子は球対称性を破り，閉殻外の粒子が多数あれば，回転楕円形の方が安定であるかも知れない．閉殻外に多数の粒子をもつ核が，球形から非常にずれているという決定的な証拠が存在している．これについては，Temmer（1958）が綜合報告をしている．

核物質の理論で運動量の保存が大事であったように，球形核においては，角運動量の保存が重要になる．一粒子準位として運動量の代りに角運動量の固有状態を用いる．もし二個の粒子が相互作用すれば，角運動量は保存され，異なった角運動量を持った配置に関するハミルトニアンの行列成分は消える．この表示で面倒なのは，量子力学における運動量の加法則に比べて，角運動の合成則がずっと複雑なことで，保存される量が運動量の場合のように三個（三方向の運動量成分）でなくて，二個（全角運動量とその一方向への射影）である．回転楕円体の核では，角運動量の射影成分だけが保存される．

光学模型（optical model）は，殻模型と密接に関係している．核による核子の弾性散乱は，核を小さい虚数部分をもったポテンシャルの井戸ですりかえて計算される．この模型は Fernbach と協力者（1949）によって提案され Feshbach 一派（1954）によって発展させられた．このポテンシャルの井戸は，殻模型のポテンシャルと似ており，殻模型の成功と光学模型の成功とが密接に関係していることは，明らかである．ポテンシャルの運動量依存性を仮定することの必要性はわかっている．これは殻模型のポテンシャルについて先に述べたことと一致する．ポテンシャルの運動量依存性については，Glassgold（1959）の論文で分析されている．

第Ⅳ章 摂 動 論

1. 摂 動 論

p. 33

摂動論を使うと，まず解きうる問題から出発して，系統的に物理的な問題の解を求めることが原則的に可能である．多体問題では，相互作用のない粒子の問題から始めて，相互作用を摂動とみなすのがしばしば便利である．摂動の効果に対する級数展開の式を書き下すのはかなりやさしいが，通常，展開の最初の二，三項をこえて，それより高次の項を求めること，あるいは級数が収束するか否かを決めることは，非常に困難なことである，しかし，展開が有用なものであるか否かは，それが収束するかどうかにかかっているのではなくて，最初の数項が良い近似を与えるかどうかにかかっている．

最初の数項の振舞いが正しい近似になっていない展開の例は，Bethe（1956）により与えられた．Brillouin-Wigner 摂動展開は，ふつう一粒子問題に対しては，Rayleigh-Schrödinger 摂動展開の改良と見なされているが，多体問題に対しては全く不適当である．無摂動ハミルトニアンを H_0，その固有状態を $|\Phi_0\rangle$，固有値を W_0 とすると，真のハミルトニアン $H=H_0+H_1$ は，次の関係をみたすような固有状態 $|\Psi_0\rangle$ と，固有値 E_0 とをもつ．

$$|\Psi_0\rangle=|\Phi_0\rangle+\frac{P}{E_0-H_0}H_1|\Psi_0\rangle \tag{4.1}$$

$$E_0=W_0+\langle\Phi_0|H_1|\Psi_0\rangle \tag{4.2}$$

(4.1) の中の演算子 P は，状態 $|\Phi_0\rangle$ を除外する射影演算子であり

$$P=1-|\Phi_0\rangle\langle\Phi_0| \tag{4.3}$$

により与えられる．状態 $|\Phi_0\rangle$ は1に規格化されているが，$|\Psi_0\rangle$ は $|\Phi_0\rangle$

とのスカラー積が1となるように規格化されている．容易にわかるように，方程式

$$(H_0-W_0)|\Phi_0\rangle=0 \tag{4.4}$$

p. 34
を，(4.1) および (4.2) と組み合わせて，

$$(H-E_0)|\Psi_0\rangle=(H_0+H_1-E_0)|\Psi_0\rangle=0 \tag{4.5}$$

が求まる．(4—5)，(4—2) 式の展開は，(4—1) を逐次代入して

$$E_0=W_0+\langle\Phi_0|H_1|\Phi_0\rangle+\langle\Phi_0|H_1\frac{P}{E_0-H_0}H_1|\Phi_0\rangle+\cdots \tag{4.6}$$

の形になる．これが，Brillouin-Wigner 展開である．

全粒子数 N が密度一定の条件の下で増す時，この展開項の振舞いを分析してみよう．H_0 を相互作用のない系のハミルトニアン，H_1 を相互作用とすると，$|\Phi_0\rangle$ は平面波の行列式である．相互作用 H_1 は，二粒子の状態を両方とも変えるか，全然変えないかのどちらかである．H_1 の対角線行列要素は N に比例し，非対角線要素は N^{-1} に比例する．(4.6) 式の右辺の最初の二項は N に比例する．第三項の中間状態の配置は，二粒子の準位だけが初期配置と異っているので，H_0 の値は N によらないある量だけ，W_0 から離れている．しかし，E_0 と W_0 との差は N に比例する量であるので，E_0-H_0 は N に比例することになる．可能な中間配置の数は N^3 に比例する．なぜなら，二粒子のどんな組み合わせも，同じ全運動量をもつという制限内で，どんな準位の対にも励起しうるからである．(4.6) の右辺の第3項には，したがって，N^{-1} の因子三つと，N^3 の因子ひとつとがあるから，結局 N によらなくなる．一般に，これより高次のどんな項をとってみても，みな N によらない．この意味するところは，大きい N の極限で展開の最初の二項のみをとればよいというのではなくて，収束が非常に遅いということにすぎないのである．

多体問題に適当と思われる展開は，Rayleigh-Schrödinger 展開である．これは，エネルギーの相互作用の強さのベキによる直接展開 (direct expansion)

であり，各項が正しい N 依存性をもっている．Schrödinger 方程式は，

$$|\Psi_0\rangle=|\Phi_0\rangle+\frac{P}{W_0-H_0}(H_1-E_0+W_0)|\Psi_0\rangle\,,$$

$$E_0-W_0=\langle\Phi_0|H_1|\Psi_0\rangle \tag{4.7}$$

と書ける．E_0 と $|\Psi_0\rangle$ とを両方同時に展開して得られる項を，その項に含まれている H_1 のベキの数にしたがって分類すると，Rayleigh-Schrödiger 展開が得られる．最初の数項は次のようになる．

$$E_0=W_0+\langle\Phi_0|H_1|\Phi_0\rangle+\langle\Phi_0|H_1\frac{P}{W_0-H_0}H_1|\Phi_0\rangle+\cdots \tag{4.8}$$

p. 35
第三項は，(4.6) の第三項と異なり，N に比例する．なぜなら，E_0-H_0 が，ここでは W_0-H_0 でおきかわっているからである．この展開の高次の項は，このように書き下していくと相当複雑なので，続く三節では，それらに対するもっと便利な記述法を考えていくことにしよう．

われわれの関心があるのは，つねにある演算子の期待値の計算であって，波動関数の計算ではない．その理由は，多体系の波動関数は非常に複雑で，どんな近似を使ってもみな，真の波動関数に殆んど直交してしまうからである．それゆえ，良い波動関数に対する判定基準 (criterion) は，その波動関数が，物理的な観測量の期待値に対して，良い近似を与えるかどうかということであって，その近似波動関数が，真の波動関数にいかに近いかということではない．一粒子摂動論では，どちらの判定基準を用いてもよい．この相違の理由は，つぎのように説明できる．近似波動関数から，ひとつの粒子が励起される確率を a であるとすると，すべての粒子が励起されないで残っている確率は，$(1-a)^N$ である．これは，N が大きい時 $\exp(-aN)$ のようにふるまい，したがって a がいかに小さくても，上の値は指数関数的に小さくなる．一方，一粒子演算子の期待値の誤差は，つねに a に比例するだけである．

2. Goldstone-Hugenholtz のグラフ法

摂動級数の各項をグラフで表わすことは，場の理論で大変有用なことが，

Feynmannにより見出された．同じ手法が，Goldstone (1957) と，Hugenholtz (1959)とにより，多フェルミ粒子系の摂動論の解析に用いられた．この二人による方法は，お互に密接に関連している．Goldstoneは，**変換関数**(development Operator)

$$U(t)=\exp(-iHt) \tag{4.9}$$

の展開を使い，Hugenholtz は，**逆核** (resolvant)

$$R(z)=(H-z)^{-1} \tag{4.10}$$

を展開した．この二つの演算子は，

$$R(z)=-i\int_{-\infty}^{0}U(t)\exp(izt)dt,\quad \mathrm{Im}\,z<0 \text{ のとき},$$

$$R(z)=i\int_{0}^{\infty}U(t)\exp(izt)dt,\qquad \mathrm{Im}\,z>0 \text{ のとき} \tag{4.11}$$

により関係づけられる．変換関数は，系が時間とともに移り変る仕方を記述する．ただし，t は $\hbar$ を単位として測った時間である．$U(t)$ の展開の方が，逆核より扱いやすい．なぜなら一般に，$U(t)$ の展開では，関数の積をとり扱うだけでよいわけだが，$R(z)$ の展開では，たたみ込みを考えねばならな
p. 36 いからである．しかし，逆核の行列要素の極が，ハミルトニアンの固有値を与えることからみて，逆核の方が，より直接な物理的解釈をもっている．

ハミルトニアンを分離して，

$$H=H_0+H_1 \tag{4.12}$$

と書き，Dyson (1949a) による $U(t)$ の展開を使う．

$$\begin{aligned}\exp(iH_0t)U(t)=&1-i\int_0^t\exp(iH_0t_1)H_1\exp(-iH_0t_1)dt_1\\&+(-i)^2\int_0^t dt_2\int_0^{t_2}dt_1\exp(iH_0t_2)H_1\exp(-iH_0t_2)\\&\times\exp(iH_0t_1)H_1\exp(-iH_0t_1)+\cdots\\=&\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-i)^n}{n!}\int_0^t\cdots\int_0^t T[H_1(t_n)\cdots H_1(t_2)H_1(t_1)]\,dt_1\cdots dt_n.\end{aligned} \tag{4.13}$$

ここに，時間に依存する $H_1(t)$ の定義は，

$$H_1(t)=\exp(iH_0t)H_1\exp(-iH_0t) \tag{4.14}$$

で与えられ，一般に，

$$Q(t)=\exp(iH_0t)Q\exp(-iH_0t) \tag{4.15}$$

と定義される．これはいわゆる，相互作用表示である．四角い括弧の前の記号 T は，括弧内の演算子の変数が，左から右へ減少するように，演算子の積を並べ変えることを意味する．これは，時間の順序づけのある積と呼ばれる．(4.13) 式は，$U(t)$ に対する正しい展開を与える．なぜなら，(4.13) 式は次の関係を満たすから．

$$(d/dt)U(t)=-iHU(t)\,,$$
$$U(0)=1\,. \tag{4.16}$$

この方法を，無限に拡がった系に応用するために，無摂動基底状態 $|\Phi_0\rangle$ として，平面波の行列式をとろう．この方法を有限の系に応用するのに根本的な困難はないが，この理論は，無限の系に対する方が，簡単な形をとる．ここで，$|\Phi_0\rangle$ は，場の理論において無摂動真空が果すのと同じ役割を果している．そしてわれわれは，N 粒子系のある任意の配置を記述するのに，その配置が $|\Phi_0\rangle$ からどれだけ違っているかという言い方をする．

$|\Phi_0\rangle$ において，占められている状態と，そうでない状態とを区別する必
p. 37 要がある．フェルミ運動量 $\hbar k_F$ 以下の運動量をもつ状態を記述するのに，文字 l を使い，フェルミ運動量より大きい運動量をもつ状態を記述するのに，文字 m を使う．発生，および消滅演算子を，次のように書き変えよう．

$$a_l=\xi^\dagger{}_l,\quad a^\dagger{}_l=\xi_l,\qquad l<k_F \text{ の時},$$
$$a_m=\eta_m,\ a^\dagger{}_m=\eta^\dagger{}_m,\quad m>k_F \text{ の時}. \tag{4.17}$$

$\xi^\dagger{}_l$ を空孔の発生演算子，$\eta^\dagger{}_m$ を粒子の発生演算子とよぶ．ここで，反交換関係は，(2.9) と同じ形をもつ．$|\Phi_0\rangle$ は，場の理論の真空のようなものである．なぜなら，

$$\xi_l|\Phi_0\rangle=\eta_m|\Phi_0\rangle=0 \tag{4.18}$$

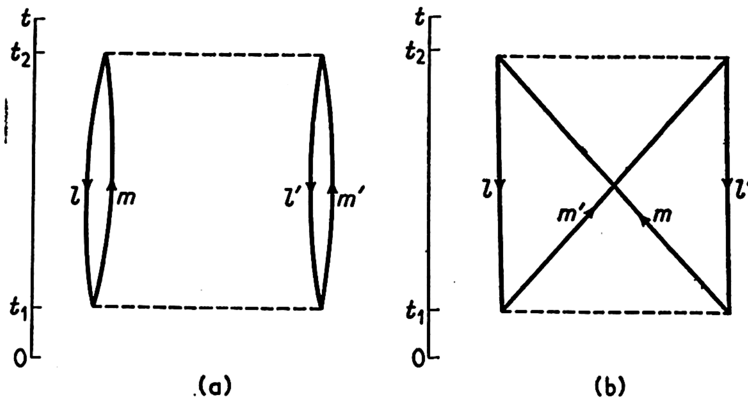
という関係が成り立ち，したがってこの状態には粒子も空孔も含まれていないからである．$\eta^\dagger{}_m|\Phi_0\rangle$ を，一粒子配置，$\xi^\dagger{}_m|\Phi_0\rangle$ を一空孔配置とよぶ．N 個の物理的粒子の配置では，“粒子”数と，空孔の数が同じである．

無摂動ハミルトニアンと，摂動を，

$$H_0=\sum_k T_k a^\dagger{}_k a_k=\sum_{l<k_F} T_l \xi_l \xi^\dagger{}_l+\sum_{m>k_F} T_m \eta^\dagger{}_m \eta_m\,,$$

$$H_1=\frac{1}{2}\Sigma V_{k_1k_2k_3k_4} a^\dagger{}_{k2} a^\dagger{}_{k1} a_{k3} a_{k_4} \tag{4.19}$$

ととると，$\langle\Phi_0|U(t)|\Phi_0\rangle$ に対する摂動級数（4.13）の項は，下記のようにして，グラフに表わすことができる．級数（4.13）の中で，特定の配置を中間状態としてもち，積分変数の特定の値をもつような，ある一つの特別の項をとってみよう．グラフの上で，0から t まで垂直な時間軸をとり，時間座標 t' に，水平な破線を描いて，$H_1(t')$ を表わそう．ある特定の時間における中間状態を表わすには，中間状態の“粒子”に対しては上向きの，空孔に対しては下向きの，太い線を描く．これらの線は，その表示する粒子または空孔を示すために記号がつけられる．配置は，相互作用のある時だけ変るので，**フェルミ線**は，破線，即ち，相互作用のある点でのみ終りになる．



2図　二次の過程のグラフ表示

$\langle\Phi_0|U(t)|\Phi_0\rangle$ の展開の第二項に寄与するグラフの例は，2図に示されている．これらは，

$$\langle\Phi_0|H_1(t_2)|\Phi'\rangle\langle\Phi'|H_1(t_1)|\Phi_0\rangle$$

を表わしている．ここで，$|\Phi'\rangle$ は配置 $\eta^\dagger{}_l\eta^\dagger{}_m\eta^\dagger{}_{l'}\eta^\dagger{}_{m'}|\Phi_0\rangle$ のことである．2(a)図からの寄与は，

$$(-i)^2|V_{ll',mm'}|^2\exp[i(T_m+T_{m'}-T_l-T_{l'})(t_1-t_2)]$$

であり，2(b)図からの寄与は，

$$(-i)^2V_{ll',mm'}\exp[i(T_m+T_{m'}-T_l-T_{l'})(t_1-t_2)]V_{m'm,ll'}$$

p. 38
である．これらのグラフからの寄与を完全に求めるには，すべての区別できる中間状態についての和を行い，$t>t_0>t_1>0$ を満たすすべての時間範囲について積分しなければならない．

3. Wick の定理

級数 (4.13) のグラフを解析するのに，Wick の定理を使うともっと簡単にできる．この定理は，(4.13) に表われるような，演算子の時間の順序づけした積と，**N-積**との関係を与える．ここで，N-積というのは，発生演算子がすべて，消滅演算子の左に来ているような演算子の積のことである．

(4.17) で与えられる発生演算子 $\xi^\dagger$ と $\eta^\dagger$，および消滅演算子 ξ と η による N-積を定義する．多数の演算子の N-積は，発生演算子が，消滅演算子より左に来るように並べかえた，演算子の積を以って定義される．ただし，ここで並べ変える時に奇数個の入れかえを行えば，マイナスの符号をつける．たとえば次のようになる．

$$N[\xi_l\xi^\dagger{}_{l'}\eta^\dagger{}_{m'}\eta_{m'}]=-\xi^\dagger{}_{l'}\eta^\dagger{}_{m'}\eta_{m'}\xi_l \tag{4.20}$$

発生演算子同志，消滅演算子同志の間の順番は，問題にならない．というのは，それらはお互に，反交換するからである．分配則

$$N[(A+B)C]=N[AC]+N[BC] \tag{4.21}$$

を使うと，発生または消滅演算子の，一つの N- 積ばかりでなくて，それら
p. 39
の和の演算子の N- 積が計算できる．定義により，N- 積の $|\Phi_0\rangle$ に対する期待値は，どれも零になるが，c- 数の N- 積だけは零でない．このことは，(4.18) からわかる．積の一番右が消滅演算子であるので，それを $|\Phi_0\rangle$ に作用させると零となり，一方積の一番左が発生演算子であるので，これを右から $\langle\Phi_0|$ に作用させると，零になる．

$\exp(iH_0t)U(t)$ に対する摂動級数には，T- 積が含まれている．つまり，ある時間変数をもった演算子は，それより早い時間を変数としてもつ演算子より左に来ることになっている．(4.19) 式によれば，相互作用は，四つの発生または消滅演算子の積であり，これら四つはもちろん同じ時間変数をもっているから，T- 積を拡張して，同じ時間変数をもつ演算子に対する場合の規則を次のようにきめる．いくつかの演算子が，同じ時間変数をもつ場合には，演算子 $a^{\dagger}$ (即ち，ここで用いる記号にしたがえば，ξ_l と $\eta^{\dagger}{}_m$) とが，演算子 a ($\xi_l^{\dagger}$ と η_m) より左に来るとする．この時も，フェルミ演算子の奇数個の入れかえに対しては，マイナスの符号がつく．T- 積もまた，分配則

$$T[(A+B)C]=T[AC]+T[BC] \tag{4.22}$$

を満たす．T- 積の例は，$t_1>t_2$ として，次式で示される．

$$T[\xi_l(t_1)\eta_m(t_2)\eta^{\dagger}{}_{m'}(t_2)\xi^{\dagger}{}_{l'}(t_1)]=-\xi_l(t_1)\xi^{\dagger}{}_{m'}(t_1)\eta^{+}_{m'}(t_2)\eta_m(t_2) \tag{4.23}$$

T- 積と，N- 積の差を，演算子の**コントラクション** (Contraction) と呼び，対になっている演算子の各々に，同数個の黒点をつけて表わすことにしよう．コントラクションはそれぞれ，一つの演算子 U と V が，ただ一つの発生，或いは，消滅演算子である時にのみ定義される．云いかえると，U または V が，いくつかの発生，あるいは，消滅演算子の積であると，コントラクションは定義されない．コントラクションの定義は，次のように書ける．

$$U^{\cdot}V^{\cdot}=T[UV]-N[UV]\,. \tag{4.24}$$

これは明らかにただの数である．なぜなら，これは零であるか，または，演算子 U と V の反交換子に，プラスあるいはマイナスの符号をつけたもの

に等しいからである．Wick の定理により

$$\widehat{T}[UV\cdots XYZ]=N[UV\cdots XYZ]+N[U^{\bullet}V^{\bullet}\cdots XYZ]$$
$$+N[U^{\bullet}VW^{\bullet}\cdots XYZ]$$
$$+\cdots+N[U^{\bullet}V^{\bullet\bullet}W^{\bullet\bullet\bullet}\cdots X^{\bullet}Y^{\bullet\bullet}Z^{\bullet\bullet\bullet}] \tag{4.25}$$

が得られる．すなわち，T- 積は，（関係する演算子すべてを含んだ N- 積）＋（その中の一組が **コントラクト** されている時，他のすべての演算子についての N- 積を，コントラクトされる対の，可能な選び方すべてについて加えたもの）＋（二組がコントラクトされている時の，残りの演算子の N- 積を，この二組の可能な選び方すべてについて加えたもの）＋… と書き直せるわけ
p. 40
である．N- 積中のコントラクションは，ただの数にすぎないが，このコントラクトされた対を，N- 積から外へ出すために奇数個の入れかえが必要であれば，マイナスの符号をつけなければならない．

$$N[U^{\bullet}V^{\bullet}W^{\bullet\bullet}X^{\bullet\bullet}]=(U^{\bullet}V^{\bullet})(W^{\bullet\bullet}X^{\bullet\bullet})\ ,$$
$$N[U^{\bullet}V^{\bullet\bullet}W^{\bullet}X^{\bullet\bullet}]=-(U^{\bullet}W^{\bullet})(V^{\bullet\bullet}X^{\bullet\bullet})\ . \tag{4.26}$$

この定理の証明は，帰納法によって行われる．二つの演算子しかない場合，この定理の成り立つことは明らかである．なぜなら，この時，(4.24) と (4.25) とは同等だからである．この定理が，n 個の演算子の積に対してつねに正しいと仮定すると，(n+1) 個の演算子の積に対しても成り立つことを，次のように証明できる．積の中で一番小さい時間変数をもつ演算子を A とすると，

$$T[UV\cdots XYZA]=T[UV\cdots XYZ]A \tag{4.27}$$

のように書かれる．A が消滅演算子である時には，これと他の演算子とのコントラクションはどれも零である．(4.25) 式の右に A を掛けると，この A を N- 積の中に含めることができる．A を含むすべてのコントラクションが零になることから，A が消滅演算子であれば，この定理は (n+1) 個の演算子について成り立つことがわかる．もし A が発生演算子であるとすると，(4.25) 式の右辺の積のすべての左側まで A を持って行くことができ

る．したがって N-積の記号の中におくことができる．A と，ある演算子との交換子は，丁度コントラクションになっており，ゆえにこの定理はここでも成立する．A がひとつの発生演算子と，消滅演算子の和であれば，分配則——これは，T-積に対しても，N-積に対しても，またコントラクションに対しても成立する.—— を使って，同様に証明することができ，この定理は $(n+1)$ 個の演算子のどのような積についても正しいことが保証される．定理が，$n=2$ のとき成り立つことは，先に述べたから，高次のすべての n についての定理が成り立つ．

反交換する二つの演算子のコントラクションは明らかに零であるが，零でないコントラクションをもつ演算子の対は，次に示すものだけである．

$$a_{l'}(t_2)^{\bullet}\,a^{\dagger}{}_{l}(t_1)^{\bullet}=\xi^{\dagger}{}_{l'}(t_2)^{\bullet}\,\xi_l(t_1)^{\bullet}=0\,, \qquad t_2>t_1 \text{ の時},$$

$$a_{l'}(t_2)^{\bullet}\,a^{\dagger}{}_{l}(t_1)^{\bullet}=-\xi_l(t_1)\xi^{\dagger}{}_{l'}(t_2)-\xi^{\dagger}{}_{l'}(t_2)\xi_l(t_1)$$

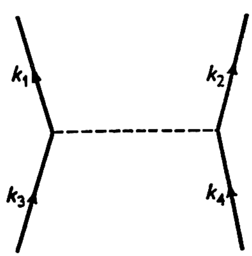
$$=-\delta_{ll'}\exp[iT_l(t_1-t_2)] \qquad t_2\leq t_1 \text{ の時}, \qquad (4.28)$$

$$a_{m'}(t_2)^{\bullet}\,a^{\dagger}{}_{m}(t_1)^{\bullet}=\delta_{mm'}\exp[iT_m(t_1-t_2)]\,, \qquad t_2>t_1 \text{ の時},$$

$$a_{m'}(t_2)^{\bullet}\,a^{\dagger}{}_{m}(t_1)^{\bullet}=0\,, \qquad t_2\leq t_1 \text{ の時}. \qquad (4.29)$$

これらのコントラクションは，**無摂動伝播関数**と呼ばれる．

このように，Wick の定理を使って，配置 $|\Phi_0\rangle$ に対する演算子の期待値の計算が簡単になる．演算子の N-積の期待値は零であり，(4.25) 式の右辺の中で消えないで残る項は，すべての演算子がコントラクトされているものだけである．p. 41 (4.13) の右辺の T-積を計算するには，まず (4.19) を使って，H を発生および消滅演算で表わし，次にこの積を，すべての可能なやり方でコントラクトする．



3図 相互作用の行列成分のグラフ表示

積をコントラクトする過程は，グラフで表わされる．

$$\frac{1}{2}V_{\kappa_1\kappa_2,\kappa_3\kappa_4}a^{\dagger}{}_{\kappa_2}a^{\dagger}{}_{\kappa_1}a_{\kappa_3}a_{\kappa_4}$$

を表わすものとして，3図に示されたグラフを描き，これを**バーテックス**と呼ぶ．バーテックスに入る線は，相互作用により消えた粒子の準位，もしくは，相互作用により生まれた空孔の準位を表わす．他方，バーテックスから出て行く線は，相互作用により作られた粒子，あるいは，消えた空孔の準位を表わす．積 $H_1(t_n)\cdots H_1(t_2)H_1(t_1)$ を表わすために，$t_1, t_2, \cdots, t_n$ の各点に，バーテックスをひとつづつ描く．各バーテックスにおいて，これに入る運動量，または，これから出ていく運動量の，すべての可能な値について加え合わせねばならない．このグラフで，コントラクションは太い線の二本をつないで表わす．ここで，つないだ線の両端で矢は同じ方向にむいていなければならない．なぜなら，発生演算子は，消滅演算子とコントラクトされた時だけ，零でない結果を与えるからである，すべての演算子が，お互いにコントラクトされると，太い線は閉じたループの組を作る．(4.28) と (4.29) にみられるコントラクションの形から，二つのバーテックスをつないでいる太い線は，両端で同じ状態に対応していなければならない．また，同じ時刻における二粒子のコントラクションは零になるので，線が自分自身とつながっている場合には，それは空孔線でなければならない．

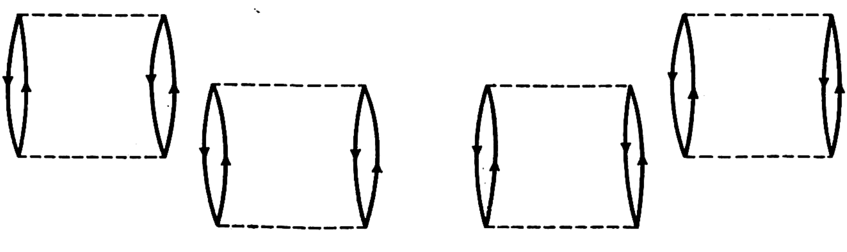
このようにして，$\langle\Phi_0|\exp(iH_0t)U(t)|\Phi_0\rangle$ に対する摂動級数は，すべてのグラフの和で与えられる．各バーテックスから，相互作用の行列要素の $-(1/2)i$ 倍が，各フェルミ線からコントラクトされた積が，閉じたループの各々から -1 の因子が，それぞれ寄与し，一つのグラフ全体からの寄与は，これらすべてを掛け合わせたものになる．因子 $-i$ は，(4.13) に表われるもので，また，コントラクションを (4.25) 式の N-積から追い出す時に，因子 -1 が出て来る．すなわち，演算子の奇数回の入れかえを行って，コントラクションをとり出す時には，因子 -1 をつけなければならないからである．

このようにして得られたグラフは，この章の第2節で求めたグラフと同じである．この両者の，ただひとつの明白な相違は，前のグラフでは，同時刻で同じ状態を示す二本の線は描けなかったということである．なぜならこれ

は，配置の中に二重に占められた準位があることを表わしているからである．ところが，この章の新しい方法では，この種の制限がない．排他律をやぶる，このようなグラフの和は，零になってしまうのである．

4. つながったグラフ

$\langle\Phi_0|\exp(iH_0t)U(t)|\Phi_0\rangle$ に寄与するグラフのなかには，二つ，または，それ以上の部分に分かれていて，それらの部分間をつなぐ線のない場合もある．そのようなグラフの例は，4(a)図に示されている．このグラフは，二つの部分に分けられ，それぞれが 2(a) 図で示されるグラフになっている．このようにして分けられないグラフを，**つながった** (linked) グラフという．すべてのつながったグラフの，展開への寄与を $\mathcal{L}(t)$ と呼ぶと，すべての展開項は，この $\mathcal{L}(t)$ を使って表わすことができる．その理由は，つながっていないグラフでは，つながった各部分から，独立な因子が寄与されるというところにある（中間状態の排他律を考慮しなければならない時には，これは正しくない） n 個のつながった部分をもつグラフからの寄与の和は，$[\mathcal{L}(t)]^n/n!$ である．なぜなら，$[\mathcal{L}(t)]^n$ に寄与するグラフのすべてが異なるものではなくて，区別できるグラフの各々は，$[\mathcal{L}(t)]^n$ の展開の中に，$n!$ 回ずつ表われる．たとえば，4 (a)図と (b)図とに示された 2 つのグラフは同等であるけれども，$[\mathcal{L}(t)]^2$ の展開には，両方とも表われる．したがって，すべてのグラフの和は，$\exp[\mathcal{L}(t)]$ で与えられることになり，次の式



(a) (b)

4図 二個のつながらない部分を持つ二種のグラフ

を得る.

$$\mathcal{L}(t)=\log[\langle\Phi_0|\exp(iH_0t)U(t)|\Phi_0\rangle]. \qquad (4.30)$$

これが，**つながったグラフによる展開**の基礎となる方程式である．これは．無限に拡がった系に対しては，とくに有用である．なぜならば，Hugenholtz (1957) が示したように；どのタイプのつながったグラフも，系のひろがり
p. 43
に比例する寄与をもち，体積に比例しないような項は現われない．有限の系に対しても，この展開は妥当である．しかし，Van Hove (1960) は，つながったグラフ展開の収束は，もとの級数の収束よりずっと悪くなることを指摘した．これは対数を使ったためで，その対数の変数が零の時には，もともとはなかったような，余分の特異性が入って来るからである．

この理論で，t は実数値には限られていない．t が複素数であると，(4.13) 式の積分経路は，複素平面の同一の経路に沿って，0 から t まで変るようにとらねばならない．T- 積は，前と同様に定義されるけれども，今度は積分経路に沿って，先に出て来る時間の値を，後に出るものより，“早い”と呼ぶことにする．伝播関数 (4.28) と (4.29) は，時間の解析関数であるから，あるグラフからの $\mathcal{L}(t)$ への寄与は，選ばれた積分経路には無関係である．

H の固有状態を $|\Psi_n\rangle$，固有値を E_n で示すと，この状態の完全系を使って (4.30) 式を展開できる．(4.9) と (4.4) を用いて，

$$\mathcal{L}(t)=iW_0t+\log[\sum_n|\langle\Phi_0|\Psi_n\rangle|^2\exp(-iE_nt)] \qquad (4.31)$$

と書ける．t が充分大きい負の虚数部分をもつようにとると，対数の中の変数への寄与のうちで，基底状態からのものが，いちばん利いてくる．したがって基底状態エネルギーに対する方程式として

$$E_0=W_0+i\lim_{\mathrm{Im}\,t\to-\infty}\frac{d\mathcal{L}(t)}{dt} \qquad (4.32)$$

がえられる．また，(4—31) より

$$\log|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2=\lim_{\mathrm{Im}\,t\to-\infty}\left[\mathcal{L}(t)-t\frac{d\mathcal{L}(t)}{dt}\right] \qquad (4.33)$$

と書けるので，真の波動関数と，無摂動関数の，スカラー積の大きさもわかるわけである．

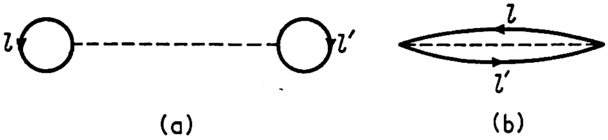
基底状態は，$|\Phi_0\rangle$ に直交しないと仮定して来た．今もし，基底状態と直交するような無摂動波動関数を選ぶとすると，摂動論の手続から，$|\Phi_0\rangle$ に直交しないような最低状態のエネルギーが出て来る．

(4.23) で必要な $\mathcal{L}(t)$ の導関数は，最後のバーテックスを時間 t にとめておいて求められる．なぜなら，$\mathcal{L}(t+\delta t)-\mathcal{L}(t)$ に寄与するのは，t と $t+\delta t$ にバーテックスをもつようなグラフだからである．伝播関数は，時間の差だけに依るので，最後のバーテックスが時間 t にあるようなすべてのグラフを集めても，最初のバーテックスが時間零にあるようなすべてのグラフを集めても，結果は変らない．それでここではあとの方をとることにしよう．バーテックスは，時間 $0, t_2, t_3, \cdots, t_n$ でおこり．t_2, t_3 等について積分しな
p. 44
ければならない．この積分は，バーテックスの順序を，$0<t_2<t_3<\cdots<t_n<t$ となるようにとめておくと，簡単になる．というのは，この時伝播関数 (4.28) と (4.29) は指数関数の形になるからである．$\mathrm{Im}\,t\to-\infty$ の極限が入用なので，変数を，t_2, t_3-t_2, t_4-t_3 等のように変えて，変数の領域が，複素平面の下半面の一つの線に沿って零から無限大までになるようにできる．これらの変数は，$\exp[-i(t_r-t_{r-1})D_r]$ という形であらわれる．ここで，D_r は，グラフの上で時間 t_r と t_{r-1} との間の，任意の水平線と交るすべての粒子線の運動エネルギーの和から，同じ水平線と交るすべての空孔線の運動エネルギーの和を引き去ったものである．たとえば，2(a)図に対する D_2 の値は，$(T_m+T_{m'}-T_l-T_{l'})$ である．積分は単に，因子 $-i/D_r$ を与える．この $-D_r$ を，バーテックス $r-1$ と r の間のエネルギー分母と呼ぶ．

5. グラフによる計算規則

摂動論をグラフで表わすために，長い議論を行って来たが，結果は簡単な一組の規則で表わされる．無限に拡がった系を考えているとして，その系の無摂動波動関数が，k_F より小さい波数をもつ平面波の行列式で表わされ，

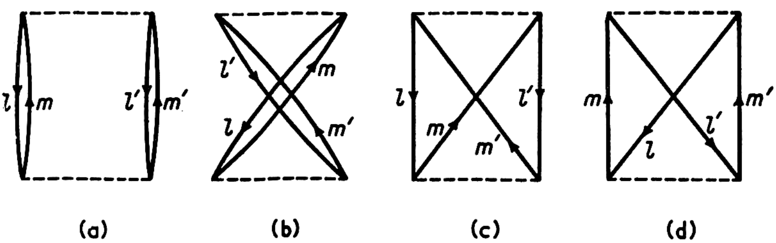
そのハミルトニアンが，(4.19)で与えられる時，その系の基底状態のエネルギーを計算するための規則は，次のように与えられる．何か他の量を計算する時には，これらの規則がどのように修正されねばならないかを，後にのべる．



5図 基底状態エネルギーに対する一次の項として現われるグラフ

エネルギーに対する n 次の寄与を計算するには，まず異なる高さに n 本の水平な破線を描く．各破線の両端を点と呼ぶ．これら n 個の点を，向きをもった線で結ぶ．この時，各点に入る線，および出て行く線が，一本づつあるようにする．これら $2n$ 本の向きをもった線の各々に，上向きの時には粒子状態の運動量（$\hbar k_F$ より大きい運動量）とスピンを対応させ，下向きの時や，自分自身とつながっている時，または，同じ高さにある他の点とつながっている時には，空孔状態の運動量（$\hbar k_F$ より小さい運動量）とスピンを対応させる．あらゆる可能なやり方で，点をお互いに結びつけ，またあらゆる
p. 45
可能なやり方で，線に状態を対応させる．ここで，つながったグラフだけをとり入れる．つながったグラフとは，独立な部分——お互に線で結びつけられていない部分——を二つ以上持たないようなグラフのことである．$n=1$と $n=2$ とに対する，可能なつながったグラフは，5図と6図とに示されている．

特定のつながったグラフからの寄与は，次の因子の積で与えられる．



6図 基底状態エネルギーに対する二次の項に現われるグラフ

1) 各バーテックスは，因子 $1/2\,V_{k_1k_2,k_3k_4}$ を与える．ここで k_1 と k_2 とは，それぞれバーテックスの左端と右端とから出て行く線，k_3 と k_4 は，バーテックスの左端と右端とで，バーテックスに入る線である．6 (a) 図で，上のバーテックスは因子 $1/2\,V_{ll',mm'}$ を与え，下のバーテックスは因子 $1/2\,V_{mm',ll'}$ を与える．

2) 隣合うバーテックスにはさまれた，$(n-1)$ 個の部分の各々からは，そこに任意に引いた水平線と交る空孔線の運動エネルギーの和から，その同じ水平線と交る粒子線の運動エネルギーの和を，引いたものの，逆数に等しい因子が寄与する．6 図のどのグラフからも，この因子として $(T_l+T_{l'}-T_m-T_{m'})^{-1}$ が与えられる．

3) フエルミ線の閉じたループの各々から，因子 -1 が，またグラフの中の各空孔線からも因子 -1 が与えられる．これらの因子は，6(a)図と (b)図に対しては $+1$ となり，6 (c)図と (d)図に対しては -1 となる．

これらの規則から，6 (a)図と (b)図の寄与は等しく，6 (c)図と (d)図の寄与は等しいことがわかる．したがって，エネルギーへの，二次の寄与の和は，

$$W_2=\frac{1}{2}\sum_{l<k_F}\sum_{l'<k_F}\sum_{m>k_F}\sum_{m'>k_F}(T_l+T_{l'}-T_m-T_{m'})^{-1}$$
$$\times(|V_{ll',mm'}|^2-V_{ll',mm'}V_{mm',l'l}) \qquad (4.36)^*$$

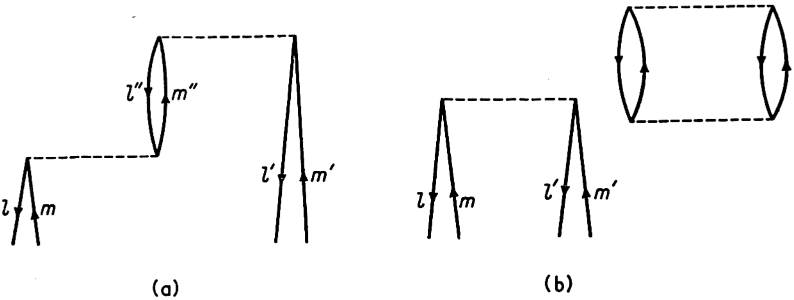
という形になる．この結果はもちろん，(4.8) からも容易に得られるものである．

同様の方法を，基底状態に関する他の量を計算するのに使う．(4.33) から，$|\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle|^2$ を計算するための規則が導かれる．この量の対数に対する級数の各項は，系の体積に比例するので，このスカラー積は，大きい系に対しては，指数関数的に小さい．

p. 46

$$\langle\Phi_0|U(t)\xi^\dagger{}_l\eta^\dagger{}_m\xi^\dagger{}_{l'}\eta^\dagger{}_{m'}|\Phi_0\rangle\exp(iW_0t)$$

* 訳者註．原著では，(4.34)，(4.35) 式がぬけている．(著者の思いちがいのためか？)。原著との式の対応を残すために，本書では原著の番号の付け方に従った．



7図　二本の外線をもったつながったグラフおよびつながらないグラフ

を計算するのに，Wick の定理が使える．$t=0$ で，l, l', m, m' を表わす線を描いて，これらを外線と呼ぼう．$U(t)$ を，(4.13) を使って展開し，相互作用を表わすのにバーテックスを描き，コントラクションを表わすためにバーテックス同志，または，バーテックスと外線をつなぎ合わせる．グラフは，7(a)図のグラフのように，外線につながっているか，または，7(b)のグラフのように，つながらない部分をもつか，のどちらかである．ある外線をもったすべてのグラフの和は，その外線につながったグラフの和と，外線をもたないすべてのグラフの和との，積である．外線をもたないすべてのグラフの和は，丁度 $\langle\Phi_0|U(t)|\Phi_0\rangle\exp(iW_0t)$ となっているので，t の虚数部分がマイナス無限大になる時，外線につながったグラフの和は，

$$\lim_{\mathrm{Im}t\to-\infty}\langle\Phi_0|U(t)\xi^\dagger\eta^\dagger{}_m\xi^\dagger{}_{l'}\eta^\dagger{}_{m'}|\Phi_0\rangle/\langle\Phi_0|U(t)|\Phi_0\rangle$$

$$=\lim_{\mathrm{Im}t\to-\infty}\frac{\sum_n\langle\Phi_0|\Psi_n\rangle\exp(-iE_nt)\langle\Psi_n|\xi^\dagger{}_l\eta^\dagger{}_m\xi^\dagger{}_{l'}\eta^\dagger{}_{m'}|\Phi_0\rangle}{\sum_n|\langle\Phi_0|\Psi_n\rangle|^2\exp(-iE_nt)}$$

$$=\langle\Psi_0|\xi^\dagger\eta^\dagger{}_m\xi^\dagger{}_{l'}\eta^\dagger{}_{m'}|\Phi_0\rangle/\langle\Psi_0|\Phi_0\rangle \qquad (4.37)$$

となる．それゆえ，基底状態波動関数の任意の成分の，$\langle\Phi_0|\Psi_0\rangle$ に対する相対的な振巾を計算するには，バーテックスの下でグラフを出て行くような，
p. 47
適当な外線をもつ，すべてのつながったグラフを描けばよい．通常の因子のほかに，外空孔線の運動エネルギーの和から，外粒子線の運動エネルギーの和を引いた量に等しい因子がある．7(a)図がこの相対振巾に与える寄与は，

$$\frac{1}{4}V_{l''l',m''m'}V_{lm'',ml''}(T_{l'}+T_{l''}-T_{m'}-T_{m''})^{-1}$$
$$\times(T_l+T_{l'}-T_m-T_{m'})^{-1}$$

同様なグラフがあと三つあるので 1/4 はなくなる，

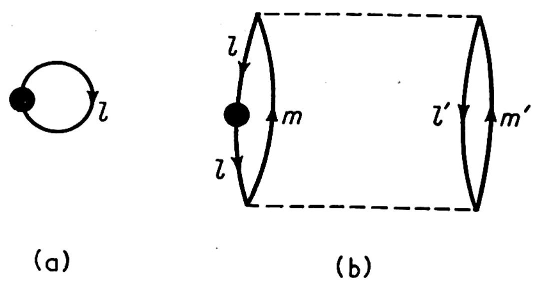
演算子の期待値も同様にして計算できる．Q を一粒子演算子とすると，非対角線成分の期待値は零になることから，Q を

$$Q=\sum_k Q_k a^\dagger{}_k a_k \tag{4.38}$$

の形にとれる．$\langle\Phi_0|U(t_1)QU(t_2)|\Phi_0\rangle\exp[iW_0(t_1+t_2)]$ の値を，Wick の定理を使って計算できる．入って来る線と，出て行く線を一本づつ持った，大きい黒点によって Q を表わし，この大きい点をグラフの原点に置く．$U(t_1)$ の表示は，0 と t_1 の間のバーテックスにより示され，$U(t_2)$ は $-t_2$ と 0 との間のバーテックスによって表現される．グラフのうちには，この大きい点につながった部分からなるものもあり，これとつながっていない他の部分をもつものもある．すべてのつながらない部分の和は，

$$\langle\Phi_0|U(t_1+t_2)|\Phi_0\rangle\exp[iW_0(t_1+t_2)]$$

になる．すべてのグラフの和を，この量で割ると，すべてのつながったグラフの和が得られる．いつもするように，t_1 と t_2 の虚数部分をマイナス無限大にもって行くと，すべてのつながったグラフの和が，$\langle\Psi_0|Q|\Psi_0\rangle$ を与えることがわかる．すべての時間座標について積分すると，通常の因子が得られる．大きい点は，因子 Q_k を寄与するようなバーテックスとして数えられる．



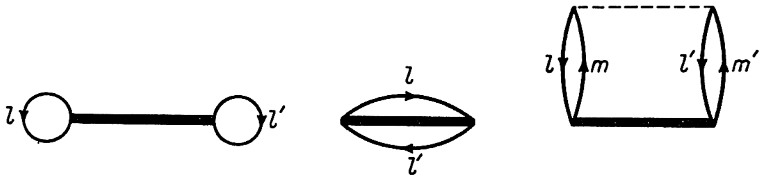
8図 一粒子演算子の期待値に寄与するグラフ

p. 48
その様なグラフの，いくつかの例は，8図に示されている．8(a)図は，Qの零次の期待値を与え，8(b)図は

$$-\frac{1}{4}Q_l|V_{ll',mm'}|^2(T_l+T_{l'}-T_m-T_{m'})^{-2}$$

を寄与する．

Qが二粒子演算子であると，それはグラフにおいて太い水平線で示される．この水平線の各端において，一本のフェルミ線が入り，一本のフェルミ線が出てゆく．その期待値は，この要素を一度だけ含むようなすべてのつながったグラフの和で与えられる．そのようなグラフのいくつかの例が，9図に示されている．



(a)　(b)　(c)

9図　二粒子演算子の期待値に寄与するグラフ

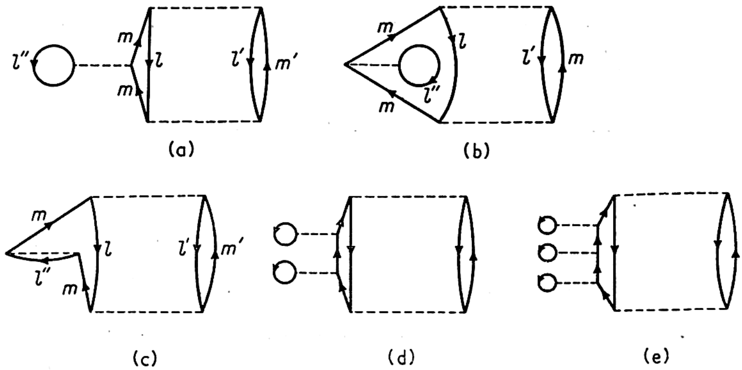
6. ハートリー・フォックのエネルギー

ハートリー・フォック の理論と， この グラフ による摂動論との関係は，Goldstone (1957) により示された．10図に示されたグラフの級数を考えょう．これらのグラフでは，特定の二次のグラフのうちの線の一本 m が，一つ，または，それ以上のバーテックスを持っていて，これらのバーテックスのもう一方の端では，フェルミ線が自分自身につながっている．これらの余分のバーテックスの各々からは，グラフに，

$$(T_l+T_{l'}-T_m-T_{m'})^{-1}(V_{ml'',ml''}-V_{ml'',l''m})$$

の寄与がある．すべての可能な空孔状態 l'' について加えると，これは丁度，

$$V_m/(T_l+T_{l'}-T_m-T_{m'})$$



10図　エネルギー分母に現われる粒子 m の運動エネルギーを，ハートリー・フォック・エネルギーで置きかえるという効果を持つような一連のグラフ

となる．ただし V_m は (3.7) に表わされるハートリー・フォック・ポテンシャルの行列成分である．10図に示されたようなグラフのすべてを，6(a)図のグラフに加えると，無限の幾何級数を得る．この級数の和は，エネルギー分母における T_m を

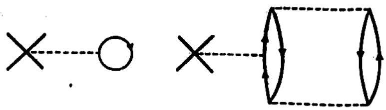
$$\epsilon_m = T_m + V_m \tag{4.39}$$

で書き変えると，それで求まったことになる．ただし級数が収束するためには，$T_m + T_{m'} - T_l - T_{l'} > |V_m|$ でなければならない．l, l', m, m' の選び方によっては，この不等式の成り立たないことがあり，したがってこの部分級数は発散することもある．しかし，これは必ずしも，全摂動展開級数が発散することを意味するものではなくて，ハートリー・フォック・エネルギーを，無摂動ハミルトニアンに含めた方が，よりよいということを暗示するだけである．

これを行うには，ハートリー・フォック・エネルギーを，無摂動ハミルトニアンに加え，その代りに摂動から引いておくとよい．式で書くと，

$$H_0 = \sum_k (T_k + V_k) a^\dagger_k a_k\,,$$

$$H_1 = \frac{1}{2}\sum V_{k_1k_2,\,k_3k_4} a^\dagger_{k_2} a^\dagger_{k_1} a_{k_3k_4} - \sum_k V_k a^\dagger_k a_k\,. \tag{4.46}$$



11図 無摂動ハミトニアンの中にハートリーフォック・エネルギーを含めた時に現われる余分のグラフ

となる．摂動の中の新しい要素は，水平な破線で表わされ，ひとつの端で入るフェルミ線と出てゆくフェルミ線が一本づつある．他の端には×を描く．これを含むグラフの例は，11図に示されている．11(b) 図のようなグラフは10(a)，(b)，(c)図と丁度消し合い，一次のグラフ 11(a)図だけが対応するグラフと消し合わない，11(a) 図のグラフは5図に加えると"無摂動"エネルギー $\sum_k(T_k+V_k)$ を，(3.8) で与えられる値 $\sum_k(T_k+(1/2)V_k)$ に変える．この値に対する補正は，第5節の規則にしたがって，すべてのつながったグラフを描く時に，同時刻の二つの点を結びつけているフェルミ線のあるグラフはすべて除くことによって得られる．このようなグラフは，新しいタイプの相互作用を含んだ対応するグラフと打消し合うからである．ハートリー・フォック方程式の解が平面波の行列式以外のものであっも，その解が表示の基底として使われてさえいれば，同じ規則が応用できる．

7. Brueckner 理論

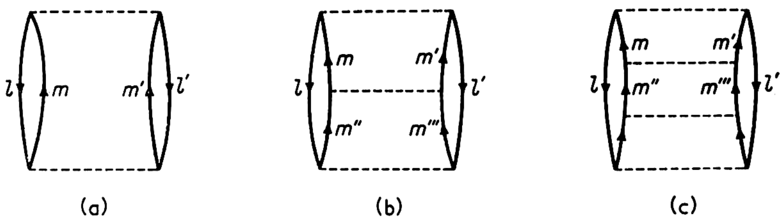
Brueckner の核構造理論は，核子間の強い相互作用による困難を取除こうという試みである．核子-核子相互作用の実験データーを分析してみると，短距離で強い反撥力のあることが示される．核子間隔が 0.5×10^{-3} cm より小さい場合には，この反撥力を無限大の正のポテンシャル（固い芯）によって表わすのが適切である．前節で見たように，そのようなポテンシャルの期待値は平面波行列式に対しては無限大になる．そうかといって，非常に小さい反撥をもつ芯を考えると，実際の核構造とのちがいが大きくなるだけである．しかし固い芯の存在を示すのは，高エネルギー（100～300 MeV）にお

ける散乱のデーターだけであり，核構造の一般的様相は，低エネルギー散乱を支配しているようなポテンシャルの特性により多く依存していると考えられる.

この理論は，もともと複雑な核による粒子の散乱理論についてなされた Watson とその協同研究者の仕事に端を発している (Watson, 1953; Francis & Watson, 1953; Watson, 1957). この仕事により，第一近似では散乱は加算的におこり，核の中の全核子が独立にこの効果に寄与することが示された. Brueckner と Watson (1953) の最初の論文では，核の結合エネルギーを π-中間子と核子との間の相互作用に関連づけようとする試みがなされた. π-中間子は核の中を動きまわり，核子に次々に散乱されたり，吸収されたりするものであると考える. 後の論文では，これらの仮想的な π-中間子は考えられていない. Brueckner 達 (1954) による論文では，核子は相互に散乱し合うとみなされている. 役らは核物質の結合エネルギーを核子-核子相互作用によって表わしたが，結果は満足なものでなかった. Brueckner と Levinson (1955)の分析によれば，散乱は真空の中ではなくて，核物質の中でおこるので，二つの効果が散乱過程を修正すると考えられる. 第一に，核子は他のすべての核子によって作られるポテンシャルの中を働いているので，単なる運動エネルギーというよりは，一種のハートリー・フォック・エネルギーをもつ.
p. 51
この効果の計算はつじつまを合わせる問題と呼ばれる. 第二に，核子はすでに占められている中間状態へは散乱されず，両方とも占められていない状態へとばねばならない. この効果の計算は中間状態に対する排他律の問題と呼ばれる. この方法の最も完全な議論は Bethe (1956) により与えられた. 後の論文には，ここに挙げなかった初期の論文も引用されている. 核物質のエネルギーと密度の注意深い計算が Brueckner と Gammel (1958 a) により行われ，実験との著しい一致が得られた. 『この一致は用いられたポテンシャルの形に敏感なように思われる. そして Brueckner と Masterson (1962) および Razay (1963) は，それぞれ核子-核子散乱の実験と合い，同時に場の理論から予想されるような遠距離における振舞をするポテンシャルは,

Brueckner と Gammel が用いたポテンシャルよりも著しく小さい結合エネルギーを与えることを示した．また Levinger 達 (1960) は結合エネルギーがテンソル力の強さに非常に鋭敏で，散乱の実験から余りはっきりきめられないことを見出している』

最初多重散乱の理論から Brueckner の理論が導き出されたが (Brueckner と協力者，1954)，これは核物質について簡単な描像を与えるものであった．しかし Brueckner と Levinson (1955) によって提案されたこの理論に対する補正は，多くの混乱とあいまいさを引きおこした．これらの補正に伴って生じた問題は，散乱理論の言葉で記述するより，摂動論の言葉で表わした方がずっとわかり易い．Goldstone (1957) と Hugenholtz (1957) の方法がこれらの問題を研究するために展開された．



12図　Brueckner 理論の基底状態エネルギーに寄与するグラフ

ハートリー・フォックの基底状態エネルギーは，無摂動基底状態に 5(a)，(b) 図および 11(a)図のようなグラフの和を加えたもので表わされるということにまず注目する．5(a) と (b)図は固い芯のポテンシャルに対して，無限大の寄与を与えるから，最初の数項が12図に示されているようなタイプのグラフの無限級数をも考慮する．この級数に交換項も一しょに含める．したがって 12(a) 図は実際には 6 図の四つのグラフでおきかえられる．この無限級数は 5 図からの寄与を含めて

$$W_1=\sum_{l}\sum_{l'}\left\{\frac{1}{2}(V_{ll',ll'}-V_{ll',l'l})\right.$$

$$+\frac{1}{4}\sum_{m}\sum_{m'}|V_{ll',mm'}-V_{ll',m'm}|^2(\epsilon_l+\epsilon_{l'}-\epsilon_m-\epsilon_{m'})^{-1}$$

$$+\frac{1}{8}\sum_{m}\sum_{m'}\sum_{m''}\sum_{m'''}(V_{ll',mm'}-V_{ll',m'm})(\epsilon_l+\epsilon_{l'}-\epsilon_m-\epsilon_{m'})^{-1}$$

$$\times(V_{mm',m''m'''}-V_{mm',m'''m''})(\epsilon_l+\epsilon_{l'}-\epsilon_{m''}-\epsilon_{m'''})^{-1}$$

$$\times(V_{m''m''',ll'}-V_{m''m''',l'l})+\cdots\Big\} \tag{4.41}$$

p. 52
となる．ここで ϵ_k は一粒子状態 k の無摂動エネルギーである．l と l' についての和はすべての占められた状態についてとられ，m, m', m'', m''' についての和は，すべての占められていない状態についてとる．これを言いかえると，粒子が一組だけ励起していて，その組の粒子が占められていない準位にいる限り，お互に何回でも相互作用し合うという場合だけを，ここで選んだグラフはとり入れている．この式は中間状態における排他律を考慮している．二粒子状態空間における行列 K を

$$K_{kk',ll'}=(V_{kk',ll'}-V_{kk',l'l})+\frac{1}{2}\sum_{m>k_F}\sum_{m'>k_F}(V_{kk',mm'}-V_{kk',m'm})$$

$$\times(\epsilon_l+\epsilon_{l'}-\epsilon_m-\epsilon_{m'})^{-1}K_{mm',ll'} \tag{4.42}$$

で定義する．この方程式を逐次解くと (4.41) の { } の中の量が $1/2\,K_{ll',ll'}$ になることがわかる．エネルギーのずれは

$$W_1=\frac{1}{2}\sum_{l<k_F}\sum_{l'<k_F}K_{ll',ll'} \tag{4.43}$$

である．

行列 K を定義する方程式 (4.42) は，二体散乱方程式のようなものであり，K は反作用行列と呼ばれることもある．多くの論文では G- 行列とか，t- 行列とか呼ばれているが，ここでは K- 行列と呼ぶ．分母に現われる ϵ が，運動エネルギーでなくて，つじつまの合ったエネルギー（次の小節で記述される意味において）であること，また中間状態についての和がフエルミ球の外の準位に限られていること等から，この式は単なる散乱方程式ではない．エネルギー分母がけつして 0 とならずに，つねに負となることに注意しょう．この方法の大きな利点は，固い芯のポテシャルに対してでも，Kが運動量空間で有限の行列成分をもつことであり，これは丁度散乱行列が有限で

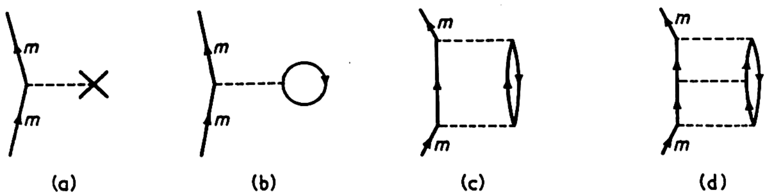
あることと同様である．一般に Bethe-Goldstone の方程式と呼ばれるこの方程式(4. 42)の解は，固い芯のポテンシャルの場合について，Bethe-Goldstone (1957)および Brueckner と Wada (1956) により論じられた．この方程式を形式的に行列方程式の形

$$K=V+V\frac{P}{e}K \tag{4.44}$$

に書くことができる．ここで P は占められた状態を除く射影演算子であり，e はエネルギー分母である．φ が運動量 l と l' をもつ平面波から成る二粒子状態であるとすると，$e\varphi=0$ が得られ，$\psi=V^{-1}K\varphi$ に対する方程式は

$$e\psi=e\varphi+PK\varphi=PV\psi \tag{4.45}$$

となる．これは二粒子に対する（局所的でないポテンシアルをもつ）Schrö-
p. 53
dinger 方程式によく似ている．この方程式は，配置空間で書き直され，通常の方法で解くことができる．



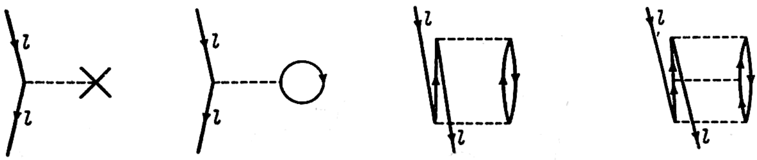
13図　Brueckner 理論において，粒子のエネルギーをつじつまが合うように選んだ時，打消し合う一連のグラフ

つじつまを合わせる問題も，同じ精神で取扱われる．ハートリー・フォックの理論では，つじつまの合ったポテンシャルは 13(a)図のような部分をもつグラフが，どれもみな 13(b)図のような部分をもつ対応したグラフによって，正確に打消されるようにとられる．13(b) 図は固い芯のポテシャルの場合には，無限大の因子を与えるので，13(c) 図および 13(d) 図のような無限級数の部分も含めなければならない．粒子mは，媒質から一つの粒子を励起し，その粒子と任意の回数だけ相互作用した後で，その粒子をまた媒質の中の初

期状態に返えす．空孔状態については，打消されたグラフは14図に示されるようなグラフの無限級数を含む．そのようなグラフは，粒子が状態 l にない時には，その状態の粒子の励起ということはおこり得ないという事実を考慮している．そのようなグラフの和は K- 行列の対角成分の和で与えられ，つじつまの合ったエネルギーは

$$\epsilon_k = T_k + \sum_{l<k_F} K_{kl,\,kl} \tag{4.46}$$

となる．(4.42)と(4.46) を組み合わせると，K- 行列を計算する問題は非常に難しくなってしまう．この解を求める方法に関しては，Brueckner と Gammel (1958a) が議論している．つじつまを合わせることの重要さは，K のベキで表わされたエネルギー展開の高次の項を調べることによって評価される (Thouless 1958)．



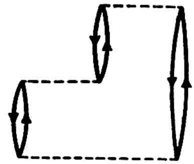
14図 Brueckner 理論において，空孔のエネルギーをつじつまが合うようにきめた時，打消し合う一連のグラフ

『Bethe, Brandow および Petscheck (1963) らの理論を注意深く調べて見ると，少し簡単化が許されることがわかる．つじつまを合わせる問題を大じかけに扱う必要はなさそうで，計算に便利なように選んだスペクトルが，近似的につじつまが合っておればそれで充分よいようである．また中間状態における排他律も簡単に扱うことができる．これらの著者達は Moszkowski と Scott (1960) が提案した方法にしたがって，ポテンシャルを長距離部分と短距離部分に分けている．弱い長距離部分は一次の摂動論で扱うことができ，強い短距離部分は単純な散乱理論で扱われる．』

p. 54

Brueckner 理論が簡単な摂動論より少しでもよいのは，短距離ポテンシ

ャルに対してのみである．この理論は二次の項はすべて含むが，Swiatecki (1956) と Thouless (1957a) の計算によれば，二次の項は，ポテンシャルを Yukawa ポテンシャルとし，交換効果も含めた時，核の密度においてわずか 1 Mev を寄与するに過ぎないことがわかっている（運動エネルギーは粒子あたり 23Mev であり，ポテンシャル·エネルギーは粒子あたり −39Mev である)．力のおよぶ範囲が粒子間隔よりずっと小さくない限り，12(b)図に示されたような三次のグラフが15図のようなグラフより大切だと仮定する理由がない．15図のようなグラフは，フェルミ球からの三粒子励起を含んでいるので，三体クラスターと呼ばれる．『Rajaraman (1963) の計算は，三体クランターのエネルギーへの寄与が，(4.42) 式のエネルギー分母の中の運動エネルギーを，つじつま合ったエネルギーですり替える程度になることを示している．』


15図　三体クラスター

Gomes とその協同研究者 (1958) は Brueckner と Gammel (1958a) のような詳しい計算は行わずに，この方法を核物質の性質を調べるために用いた．彼らは ψ が (4.45) の φ と異なるのは，核子がお互に非常に近づいた場合だけであることを見出し，この二つの波動関数が殆んど等しくなる距離を**回復距離** (healing distance) と呼んだ．この回復距離は排他律の効果によりずつと小さくなる．De-Shalt と Weisskopf (1958) の論文では，Brueckner 理論に対する補正は小さいことが示されている．回復距離の内側でおこっていることは，原子核の低エネルギー的な性質に敏感にきかない．これが殻模型が成功している理由の説明と考えられている．このことは原子核の表面領域ではそれほど確かでない．なぜなら，その領域では排他律が内部における程強い効果をもたず，Brueckner 理論に対する補正が重要になって来るからである．

磁気能率の計算 (Amado, 1958) のようなある種の計算に対しては，殻模型の妥当性が固い芯の存在によって損なわれることはないが，簡単な殻模型では説明のつかないいくつかの効果があって，そんな効果が存在すること自

身が原子核内に固い芯による相関があることのよい確証になっている．そのような効果というのは，高エネルギー過程であって，原子核の基底状態の中に高い励起状態の粒子が存在することに基づいている．たとえば原子核による高エネルギー光子の吸収は，二つの相関し合う粒子が光子のエネルギーを受取る時にだけおこるのであるが，このような過程は実際容易におこる．そのような相関があることに対する証拠については Brueckner 達 (1955) によって解析されている．

『核物質の理論およびこれらの方法の理論への応用については，Bell と Squires (1961) の解説がある．』

p. 55

核物質については芯の半径は 0.5×10^{-13}cm 位であるが，粒子密度は $(4\pi/3\cdot r_0^3)^{-1}$ で与えられ，r_0 は 1.1×10^{-13}cm である．液体 He^3 に対しては芯の半径(原子の直径)は 2.5×10^{-8} cm で，r_0 は 2.33×10^{-8} cm であるから，この方法によって液体 He^3 の性質を計算した結果 (Brueckner と Gammel 1958b) が，核物質の性質を計算した時の結果程よくなかったのは驚くにあたらない．しかし定性的には，液体 He^3 は核物質に似ていると思われる．というのは液体 He^3 の密度は同じ原子間力をもった古典的液体に対して期待されるものより遙かに小さいからである．飽和密度は一方ではポテンシャルの引力部分，他方では運動エネルギーとポテンシャルの斥力部分の両者の釣合によってきまる．Brueckner 理論では，はげしく変化するポテンシャル V が，ゆっくり変る行列 K によっておきかえられているので，上にのべたような問題が扱えるのである．

8． 有限の大きさの核に対する Brueckner 理論

核物質に対する K- 行列の計算の結果を使って，有限の大きさの原子核の構造を計算できる (Brueckner と協同研究者，1958)．K- 行列を配置空間で書き表わすと，K が V と異なるのは，二個の相互作用する粒子間の距離が 10^{-13} cm (これが回復距離である) よりも短いような所だけであることがわかっている．このような短距離では V は局所的で非常にはげしく変化する

が，Kの方は非局所的で密度に関係し，ゆっくり変化してハートリー・フォック型の計算に全く適している．さて，実際の原子核の密度はポテンシャルの到達距離程度の範囲では大きく変るので，トーマス・フェルミの方法を応用する試みは成功しなかったわけであるが，K行列の密度依存性が重要になるような 10^{-13}cm 程度の範囲では，密度はそんなに変化しない．方程式 (4.43) によれば，基本状態のポテンシャル・エネルギーは K-行列の対角成分の和に等しい．この事情は丁度ハートリ・フォック理論で，エネルギーが，ポテンシャルの対角成分の和に等しいのと同じである．K は (4.42) のような方程式によって定義され，そこでは中間状態についての和は，与えられた有限の大きさの核において占められていないすべての準位について加え合わすことになるが，K- 行列の密度に依存する部分は短い到達距離をもっているので，K- 行列は局所的密度だけによると仮定しても差支ない．こうして計算はある意味では，ハートリー・フォック法とトーマス・フェルミ法の組み合わせになる．

この変分法の使い方は Brueckner と Goldman (1959) によって記述され
p. 56 ている．特定の試行波動関数を選ぶと基底状態エネルギーの期待値は

$$E_0=-(\hbar^2/2M)\sum_{i=1}^{A}\int\psi_i^*(r)\nabla^2\psi_i(r)d^3r$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{A}\sum_{j=1}^{A}\iiiint\psi_i^*(r_1)\psi_j^*(r_2)K^{(\rho)}(r_1,r_2;r_3,r_4)\psi_i(r_3)\psi_j(r_4)$$
$$\times d^3r_1d^3r_2d^3r_3d^3r_4 \qquad (4.47)$$

となる．(4.42) で K を反対称的と定義したので，交換項を含める必要はない．K の中に含まれる密度 ρ としては点 $(1/4)\cdot(r_1+r_2+r_3+r_4)$ における粒子密度に等しくとる．(4.47) 式を最小にするように，一粒子波動関数をとらねばならない．この方程式における波動関数を変分すると

$$-(\hbar^2/2M)\nabla^2\psi_i(r)+\sum_{j=1}^{A}\iiint\psi_j^*(r_1)K^{(\rho)}(r,r_1;r',r_2)\psi_j(r_2)\psi_i(r')$$
$$\times d^3r_1d^3r_2d^3r'$$

$$+\frac{1}{2}\sum_{j=1}^{A}\sum_{k=1}^{A}\iiiint\psi_j^*(r_1)\psi_k^*(r_2)K'^{(\rho)}(r_1,r_2;r_3,r_4)\psi_j(r_3)\psi_k(r_4)$$
$$\times\delta\left[\frac{1}{4}(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2+\mathbf{r}_3+\mathbf{r}_4)-\mathbf{r}\right]d^3r_1d^3r_2d^3r_3d^3r_4\psi_i(r)$$
$$=\epsilon_i\psi_i(r) \tag{4.48}$$

が導かれる．この方程式の左辺の最初の二項は，(3.11) のハートリー・フォックの理論に現われる項と同じである．左辺の第三項は新しいもので，K-行列の密度依存性からでてくる．ここで $K'^{(\rho)}$ は行列式 $K^{(\rho)}$ を密度で微分したものである．一粒子状態のポテンシャル・エネルギーのこの部分は，**配置がえのエネルギー** (rearrangement energy) と呼ばれる．こう呼ばれる理由は，K- 行列が粒子間の相関効果の一部を含んでいるからである．すなわち密度が変わると粒子は自ら配置がえを行い，したがって K- 行列も変わる．

一粒子エネルギー準位 ϵ_i の (4.48) による定義は，配置がえのエネルギーを含まない (4.46) による定義よりもよい．それは前者が励起状態のエネルギーを正しく与えるからである．とくにフェルミ面にある粒子のエネルギーは，系の全粒子の平均エネルギーに等しくなければならないという，Bethe (1956), Hugenholtz と Van Hove (1958) の定理が，上の ϵ_i によってみたされている．フェルミ面上の粒子のエネルギーは，系の体積を変えずに，系に一つの粒子を加えた時に得られる余分のエネルギーであり，平均
p. 57
エネルギーは，系の密度を変えずに，一粒子加えた時の余分のエネルギーである．圧力0で系が平衡にある時，上の二つの量は等しくなければならない．配置がえのエネルギーについては Thouless (1958) により一般的に論じられ，Brueckner 達 (1960 a) により核物質について計算された．配置がえのエネルギーの一つの効果は，全エネルギーと運動エネルギーおよび粒子エネルギーとの関係 (3.8) がもはや成り立たないことである．この関係式が正しいのは (4.43) からわかるように一粒子エネルギーが，(4.46) により定義されている時だけである．

『この方法を用いた計算は Brueckner 達 (1961) によって O^{16}, Ca^{40} お

よび Zr^{90} に対して，また Masterson と Lockett (1963) によって Ca^{40} と Pb^{208} に対して遂行され，かなり満足な結果が得られた．Eden 達 (1959) がこの方法に対して反対を唱えている．(4.47) の波動関数は，K をとめておいて変分されるべきで，その時には (4.48) に配置がえのエネルギーは現われないというのが彼らの主張である．しかしこの項を入れないで計算すると実験との一致は悪くなる．』

9．K-行列の発散

K- 行列の計算は成功しているが，K- 行列が運動量のある値に対して発散するという可能性はある．このことは De Domenicis (1959) により指摘された．彼は (4.42) を分離できるポテンシアルについて解いて見た．分離できるポテンシアルというのは，初期状態と終状態の運動量が等しい時行列成分が初期状態の関数と，終状態の関数との積に等しいようなポテンシャルのことである．したがって次のように書くことができる．

$$V_{kk',k''k'''}=-v^*(k,k')v(k'',k''')\delta_{k+k',k''+k'''} \tag{4.49}$$

すると K に対する方程式は

$$\begin{aligned}K_{mm',ll'}=&-v^*(m,m')v(l,l')\delta_{m+m',l+l'}\\&-\frac{1}{2}\sum_{m''>k_F}\sum_{m'''>k_F}v^*(m,m')v(m'',m''')\delta_{m+m',m''+m'''}\\&\times(\epsilon_l+\epsilon_{l'}-\epsilon_{m''}-\epsilon_{m'''})^{-1}K_{m''m''',ll'}\end{aligned} \tag{4.50}$$

となる．これに $v(mm')(\epsilon_l+\epsilon_{l'}-\epsilon_m-\epsilon_{m'})^{-1}$ をかけ．すべての m, m' について加え合わせると，一つの一次方程式になり解は

$$\begin{aligned}&\sum_{m>k_F}\sum_{m'>k_F}v(m,m')(\epsilon_l+\epsilon_{l'}-\epsilon_m-\epsilon_{m'})^{-1}K_{mm',ll'}\\&\qquad=2v(l,l')X(l,l')/[1-X(l,l')]\end{aligned} \tag{4.51}$$

の形に求まる．ここで X は次の関係をみたす．

$$X(l,l')=\frac{1}{2}\sum_{m>k_F}\sum_{m'>k_F}|v(m,m')|^2(\epsilon_m+\epsilon_{m'}-\epsilon_l-\epsilon_{l'})^{-1}\delta_{m+m',l+l'}. \tag{4.52}$$

p. 58
(4.51) を (4.50) に代入し返えすと次の形に書きかえられる.

$$K_{mm',ll'}=-v^*(m,m')v(l,l')\delta_{m+m',l+l'}/[1-X(l,l')] \tag{4.53}$$

l と l' がフェルミ球のある一つの直径の両端に近づくと, X が無限に大きくなることが簡単に示される. 運動量 l, l' を反対の大きさにとると, m と m' も反対の大きさになる. (4.52) の右辺の和の中で発散を与えるものは, m と m' がフェルミ面に近いものである. この領域では $|v(m,m')|^2$ を一定とおくことができ (ただしこの定数がフェルミ面で 0 になると, 以下の議論は成立しなので除外する), エネルギー分母は $m-l$ の定数倍になる. ある特定のエネルギー領域にある状態数はゆるやかに変わるので, (4.52) の右辺の和は l が k_F に非常に近いとき $-\log(k_F-l)$ に比例する. 和はつねに正で, l, l' がフェルミ面からはなれている時には小さい. したがってある点で 1 になるはずである. もし X が 1 になれば (4.53) から K-行列は発散することがわかる.

同様の発散は他の引力ポテンシャルでもおこり, 必ずしも分離できるポテンシャルの場合のみとは限らない. 現在では, この発散は核物質の "超流動性" と緊密に関係していることが知られており, これについては後に超伝導理論を論ずる時にもつと詳しく考えよう. (4.42) を数値的に計算すると発散は現われそうもないが, これはフェルミ面に近い運動量についてだけ発散が重要になるからである.

Bruecker 理論およびその核物質や液体 He^3 への応用については, Les Houches における1958年の夏の学校の講義* の中で Brueckner がもつと完全に議論している. Hugenholtz, Thouless, Weisskopf の講義もこの章で議論された問題と関係がある.

---

* "The Many-Body Problem" Methuen, London 1959 として出版された. 以下では "The Many-Body Problem" として引用する.

第V章　低い励起状態

1. グリーン関数と集団変数

p. 59

前の二章では，多体系の基底状態のエネルギーや，その他の性質をきめる方法について考えた．多体系の励起状態を考える場合には，一粒子の量子力学では普通起こらないような困難が存在する．多体系を励起するしかたは無数にあるから，励起状態が重なり合うのである．もしもある励起状態の寿命が短くて，そのエネルギーの不確定さが隣にある励起状態からのへだたりよりも大きければ，もはやその状態を定常状態と呼ぶことはできない．それに，殆んど縮退した系に対しては，普通の形の摂動論は，エネルギー分母が非常に小さくなるために適用できない．

しかし幸なことに，複雑な系の励起状態についての完全な知識が必要なわけではない．原子や原子核の最低励起状態は観測可能で，そのエネルギーも寿命も実測されるが，固体や液体のようなひろがった系では，普通励起状態のエネルギーは基底状態まで連続的につながっている．そのような系に対しては，特別の励起状態についての完全な記述よりは，基底状態にある一個ないし二個の粒子の準位を変えることによって，どんな励起状態が生ずるかを知る方がより重要である．このようにして得られる励起状態がわかれば，二次の摂動論を使って，系の多くの重要な物理的性質を計算することができるのである．こうして計算できる性質といえば，偏極率，帯磁率，光や音の減衰率などである．たとえば偏極率ならば

$$\sum_n |V_{0n}|^2(E_0-E_n)^{-1}$$

を計算すればよい．ただし V_{0n} は，加えられた静電ポテンシャルの，基底 p. 60 状態とエネルギー E_n の励起状態を結ぶ行列成分である．静電ポテンシャルは一粒子演算子であるから，その行列成分が0でないのは，一粒子の準位が異なる配置間を結ぶものだけである．

グリーン関数と呼ばれる関数は，一粒子ないし二粒子の準位を変えることによって，どんな状態がつくられるかについての完全な記述を与えてくれるので，物理的に観測される量と非常に密接に結びついている．これに関して二つの問題が生ずる．一つはグリーン関数がどんな数学的性質をもち，グリーン関数と系の物理的性質の間にどんな関係が存在するかを見出すことである．グリーン関数の数学的性質は非常に重要で，それが**分散公式**（dispersion relations）とか**総和則**（sum rules）に導くのである．第二の問題は，粒子間の相互作用からグリーン関数を計算することであり，この計算にわれわれは摂動論を用いる．これら二つの問題は別々のものでなくて，両者を同時に念頭におかなければならない．

励起状態を調べるのに，グリーン関数法と大変ちがったように見える別の方法がある．系のハミルトニアンと可換な演算子があると，それに対応する物理量は保存される．たとえば系の全運動量はそのような量で，われわれはそれを**集団変数**（collective variable）と呼ぶ．このほかに，近似的にしか保存されないような別の集団変数もあり，普通それらの方が興味がある．集団変数の値だけが基底状態と異なるような励起状態があり，そのような状態にある系は，**固有**（intrinsic）励起でなくて**集団**（collective）励起をもつといわれる．どのような集団変数があるかは，しばしば古典的な系との類似から暗示される．たとえば古典論からの類推によって，回転体状の原子核は回転的集団運動をすることができると期待される．グリーン関数法と集団変数の方法との関係について後で少し詳しく取上げる．

無限にひろがった系のエネルギー準位についてのさらに有用な情報が，系の熱力学的性質からも得られる．有限温度にある系の性質は，一定の平均エネルギーをもったエネルギー準位群の平均的性質によってきまる．熱力学

的性質を計算する方法は第VI, VIIおよびVIIIの各章で論ずる.

2. 一粒子グリーン関数

無限にひろがった系を考え，その基底状態の波動関数 $|\Psi_0\rangle$ が運動量の固有状態であり，その固有値が0であるとする.p. 61 一粒子グリーン関数は

$$S_k(t_1-t_2)=\langle\Psi_0|T[a_k(t_2)a^{\dagger}_k(t_1)]|\Psi_0\rangle \tag{5.1}$$

で定義される. ここに $a_k(t)$ は次で与えられる.

$$a_k(t)=\exp(iHt)a_k\exp(-iHt) \tag{5.2}$$

注意すべきことは，(4.15) では消滅演算子と発生演算子の時間変化は無摂動系のハミルトニアンを用いて定義されていたのに対して，ここではこれらの演算子の時間変化は，系の全ハミルトニアンを用いて定義されていることである. この章では，相互作用表示の代りにハイゼンベルグ表示を用いる. $a^{\dagger}_k$ および a_k は，運動量 k とある特定のスピンをもった粒子をつくったり消したりする演算子である. 発生演算子と消滅演算子が同じ準位に属さないようなグリーン関数を定義することもできるが，$|\Psi_0\rangle$ は全運動量と合成スピンの固有状態であるから，そのようなグリーン関数は無限にひろがった系では消えてしまう. 有限の系に対しては，発生演算子と消滅演算子の別の組を用いた方が便利なことがありうるが，そのときには，(5.1)式の右辺の発生演算子と消滅演算子が互にちがった状態に関するものであっても，一粒子グリーン関数は消えない. 方程式 $H|\Psi_0\rangle=E_0|\Psi_0\rangle$ と T-積の定義を用いると，

$$S_k(t_1-t_2)\begin{cases}=\langle\Psi_0|a_k\exp[i(H-E_0)(t_1-t_2)]a^{\dagger}_k|\Psi_0\rangle & t_1<t_2\\ =-\langle\Psi_0|a^{\dagger}_k\exp[-i(H-E_0)(t_1-t_2)]a_k|\Psi_0\rangle & t_1<t_2\end{cases} \tag{5.3}$$

となる. もし $H=H_0$, したがって $|\Psi_0\rangle=|\Phi_0\rangle$ であるとすると，この定義は，演算子 a_k と $a^{\dagger}_k$ のコントラクトした積の定義 (4.28) および (4.29) と同等になる. この関数を準位 k の**真の伝播関数**と呼び，先に定義した無摂動系の伝播関数と区別する. さて，運動量 k の粒子を時刻 t_1 において基底状態につけ加え，そうしてできた系を時刻 t_2 まで自由に変化させて，その

後運動量 k の粒子を t_2 で取除いたとする．こうして得られる状態と基底状態とのスカラー積は，(5.3) によれば $S_k(t_1-t_2)$ に等しい．$t_1>t_2$ に対しては，まず時刻 t_2 で運動量 k の粒子を取除き，後時刻 t_1 においてその粒子をもとにもどすと解釈する．

どのような一粒子演算子の期待値も，一粒子グリーン関数から直ちに求められる．たとえば準位 k にある粒子の平均数は (5.3) 式によって

$$\langle n_k\rangle=-\lim_{t\to+0} S_k(t) \tag{5.4}$$

となる．この式を使うと任意の一粒子演算子の期待値を計算することができ

p. 62

る．とくに運動エネルギー演算子の期待値は

$$\langle T\rangle=\sum_k(\hbar^2k^2/2M)\langle n_k\rangle=-\lim_{t\to+0}\sum_k(\hbar^2k^2/2M)S_k(t) \tag{5.5}$$

となる．ポテンシャル・エネルギーの期待値も同様に求められる．それには

$$\begin{aligned}\lim_{t\to+0} dS_k(t)/dt &=i\langle\Psi_0|a^\dagger{}_k(H-E_0)a_k|\Psi_0\rangle\\ &=-i\langle\Psi_0|[H, a^\dagger{}_k]a_k|\Psi_0\rangle\end{aligned} \tag{5.6}$$

を用いる．すなわち，もし

$$H=T+V=\sum_k T_k a^\dagger{}_k a_k+\frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}\sum_{k''}\sum_{k'''}V_{kk',k''k'''}a^\dagger{}_{k'}a^\dagger{}_k a_{k''}a_{k'''} \tag{5.7}$$

とすると，交換子は

$$[H, a^\dagger{}_k]=T_k a^\dagger{}_k+\frac{1}{2}\sum_{k'}\sum_{k''}\sum_{k'''}(V_{k'k'',k'''k}-V_{k'k'',kk'''})a^\dagger{}_{k''}a^\dagger{}_{k'}a_{k'''} \tag{5.8}$$

となるから，これを (5.6) に代入して

$$\lim_{t\to+0}\sum_k dS_k(t)/dt=-i\langle T\rangle-2i\langle V\rangle \tag{5.9}$$

が得られる．この結果と (5.5) とを組合わせることによって，ハミルトニアンの期待値 E_0 を求めることができ，それは

$$E_0=\frac{1}{2}\lim_{t\to+0}\sum_k\left[\frac{\hbar^2k^2}{2M}S_k(t)+i\frac{dS_k(t)}{dt}\right] \tag{5.10}$$

で与えられる．もしも相互作用が対角成分のみを持ち，したがってハートリー・フォックのエネルギーが厳密であるときは，この式は(3.8)と同じになる．

一粒子グリーン関数がみたすもう一つの関係式は，a_k と $a^\dagger{}_k$ の反可換性から導かれる．それは次の関係式である

$$\lim_{t\to+0}[S_k(-t)-S_k(t)]=\langle\Psi_0|(a_ka_k^++a_k^+a_k)|\Psi_0\rangle=1 \qquad (5.11)$$

二つの総和則（5.10）（5.11）は，Galitskii と Migdal（1958）によって導かれた．この節で議論したその他の結果の大ていは彼らの論文に見られる．

グリーン関数のフーリエ変換を調べることによって，グリーン関数がみたす分数公式を見出すことができる．ある関数と，そのフーリエ変換とに対して同じ関数記号を用い，それらの関数の変数に用いられる文字によって両者を区別するのが便利である．実変数 t の任意の関数はつねに

$$f(t)=f^{(a)}(t)+f^{(r)}(t) \qquad (5.12)$$

と書くことができる．p. 63 $f^{(a)}(t)$ は進んだ部分で（advanced part）$t<0$ に対しては消え，$f^{(r)}(t)$ はおくれた部分（retarded part）で $t\geq0$ に対して消える．進んだ部分のフーリエ変換は複素平面の下半面で

$$\begin{aligned} f^{(a)}(z)&=i\int_0^\infty f(t)\exp(-izt)dt \\ &=i\int_{-\infty}^\infty f^{(a)}(t)\exp(-izt)dt \end{aligned} \qquad (5.13)$$

により定義でき，またおくれた部分のフーリエ変換は上半面において

$$\begin{aligned} f^{(r)}(z)&=i\int_{-\infty}^0 f(t)\exp(-izt)dt \\ &=i\int_{-\infty}^\infty f^{(r)}(t)\exp(-izt)dt \end{aligned} \qquad (5.14)$$

で定義できる．（5.3）によれば，$S_k(t)$ の進んだ成分およびおくれた成分のフーリエ変換は，それぞれ

$$\begin{aligned} S_k^{(r)}(z)&=\langle\Psi_0|a_k(H-E_0-z)^{-1}a^\dagger{}_k|\Psi_0\rangle, \\ S_k^{(a)}(z)&=-\langle\Psi_0|a^\dagger{}_k(H-E_0+z)^{-1}a_k|\Psi_0\rangle \end{aligned} \qquad (5.15)$$

で与えられる．これら二つの関数を調べるために，媒質は無限大でなくて，有限の体積の中にとぢこめられているものと仮定しよう．運動量は保存されるように週期条件を課しておく．そうすると一定の粒子数に対して，ハミル

トニアンの固有値は連続的でなくて離散的になる．体積を増してゆくと，固有値は互に接近し，体積が無限大になった極限で連続的につながってしまうものと期待される． またある限界値以上の固有値は無視でき， したがって $S_k^{(r)}(z)+S_k^{(a)}(z)$ が大きい z に対して $-1/z$ の形で0に近づくと仮定することが必要である．

(5.15) 式は展開して，ハミルトニアンの固有値についての和の形に書くことができる．おくれた部分の中間状態は，$N+1$ 粒子を含むから，固有値を $E_n^{(N+1)}$ とする．進んだ部分に対する中間状態は $(N-1)$ 粒子を含み，固有値は $E_n^{(N-1)}$ で表わされる．N は $|\Psi_0\rangle$ に含まれる粒子数である．すると展開した結果は次のようになる．

$$\begin{aligned} S_k^{(r)}(z) &= \sum_n |(a^\dagger{}_k)_{n0}|^2 (E_n^{(N+1)}-E_0^{(N)}-z)^{-1}, \\ S_k^{(a)}(z) &= -\sum_n |(a_k{}^\dagger)_{0n}|^\dagger{}_k{}^2 (E_n^{(N-1)}-E_0^{(N)}+z)^{-1} \end{aligned} \qquad (5.16)$$

これら二つの関数はもともと，それぞれ一つの半面だけで定義されていたが，(5.16) により関数をそれぞれ他の半平面へ解析接続できる．p. 64(5.16) から明らかに

$$S_k(z^*) = S_k^{(r)}(z^*) + S_k^{(a)}(z^*) = S_k^*(z) \qquad (5.17)$$

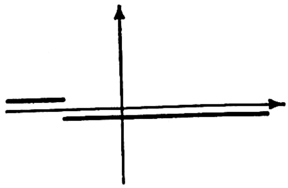
が成立つ．$S_k^{(r)}(z)$ の極は実軸上 $z=\mu(N)=E_0^{(N+1)}-E_0^{(N)}$ より大きいところにあり，$S_k^{(a)}(z)$ の極は実軸上 $z=\mu(N-1)=E_0^{(N)}-E_0^{(N-1)}$ より小さいところにある．関数はそれ以外では至る所解析的である．

密度を一定に保ちつつ粒子数を増してゆくと，ハミルトニアンの固有値どうしはお互に接近する．$S_k(z)$ の特異点はお互に限りなく接近するが，無限大の系になっても，関数は実軸以外ではやはり解析的である．実軸上の関数値を

$$\begin{aligned} S_k^{(r)}(x) &= \lim_{y\to+0} S_k^{(r)}(x+iy) \\ S_k^{(a)}(x) &= \lim_{y\to+0} S_k^{(a)}(x-iy) \end{aligned} \qquad (5.18)$$

で定義する．それには実軸のすぐ下 $\mu(N)$ から ∞ までと．すぐ上 $\mu(N-1)$ から $-\infty$ までに16図に示すような切断を入れなければならない．(5.17) か

ら明らかなように，$S_k(z)$ の実数部分は切断を横切って連続であるが，虚数部分は0でない限り不連続である 実軸に沿って$-\infty$から$+\infty$までと上半面内の半円とでとぢるような積分路 C_r に沿って $S_k^{(r)}(z)$ を積分し，また実軸と下半面内の半円でとぢた積分路 C_a に沿って $S_k^{(a)}(z)$ を積分すると，分散公式が求められる． 無限遠で $S_k(z)$ は $-1/z$ のように振舞うから



16図 一粒子グリーン関数の実軸上での値を定義するために入れられる切断

$$\int_{-\infty}^{\infty}[S_k^{(r)}(x)-S_k^{(a)}(x)]\,dx-\pi i=\int_{C_r}S_k^{(r)}(z)dz-\int_{C_a}S_k^{(a)}(z)dz=0 \qquad (5.19)$$

p. 65
が得られこれは (5.11) と同等である． 同様に関係式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{S_k^{(r)}(x')}{x'-z}dx'=\begin{cases}2\pi i\,S_k^{(r)}(z), & \mathrm{Im}\,z>0,\\ 0, & \mathrm{Im}\,z<0,\end{cases} \qquad (5.20)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{S_k^{(a)}(x')}{x'-z}dx'=\begin{cases}0, & \mathrm{Im}\,z>0,\\ -2\pi i\,S_k^{(a)}(z), & \mathrm{Im}\,z<0,\end{cases}$$

が得られる．(5.19) と (5.20) が $S_k(z)$ のみたす最も重要な分散公式である． $S_k^{(r)}(z)$ の虚数部分は上半面で正であり， 実軸上でもそうであるが，$S_k^{(a)}(z)$ は虚数部分は下半面で負になり実軸上でも負である． このことは (5.15) と (5.18) から明らかである． 強度関数 $g_k(x)$ を

$$g_k(x)=g_k^{(r)}(x)+g_k^{(a)}(x),$$

$$g_k^{(r)}(x)=\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\,S_k^{(r)}(x)=\sum_n|(a^\dagger{}_k)_{n0}|^2\delta(x-E_n^{(N+1)}+E_0^{(N)}),$$

$$g_k^{(a)}(x)=-\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}\,S_k^{(a)}(x)=\sum_n|(a^\dagger{}_k)_{0n}|^2\delta(x+E_n^{(N-1)}-E_0^{(N)}) \quad (5.21)$$

で定義することができる。強度関数は状態 $a^\dagger{}_k|\Psi_0\rangle$ と $a_k|\Psi_0\rangle$ の ($E_0^{N)}$ から測った) 励起エネルギーの分布を与える． (5.19) と (5.20) の虚数部分をとると

$$\int_{-\infty}^{\infty} g_k(x)dx = 1 \tag{5.22}$$

$$\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty} g_k(x')(x'-x)^{-1}dx' = 2\mathrm{Re}S_k(x) \tag{5.23}$$

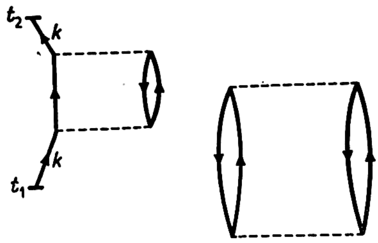
が得られる．したがって強度関数の進んだ部分とおくれに部分がグリーン関数を完全に決定することになる．たとえ全強度関数だけがわかっていて，その部分は別々にわからなくても，分散公式 (5.20) を用いて，実軸以外のいたるところでのグリーン関数の値を計算することができる．

3. グリーン関数の摂動計算

前章でのべた方法によって，グリーン関数を計算することができる．p. 66 $t_2'>t_2>t_1>t_1'$ に対する次のような量

$$\langle\Phi_0|U(t_2'-t_2)a_kU(t_2-t_1)a^\dagger_kU(t_1-t_1')|\Phi_0\rangle$$

を計算するのに Wick の定理を用いる．a_k^+ と a_k を表わすのに，それぞれ時刻 t_1 でグラフに入る線 k と，時刻 t_2 でグラフから出てゆく線 k を画く．変換関数 U の摂動展開は，t_1' と t_2' の間にはさまる任意の数の頂点で表わされ，コントラクションの結果は，一本の外線があることを除けば基底状態のグラフに似たグラフを与えることになる．13図と14図がそのようなグラフを示し，その他の例は17図と18図に与えてある．これらのグラフはつながっている場合もあり，つながっていない場合もある．後者の場合は，グラフは外線につながった部分と，外線を持たない部分とから成る．外線のない部分一個をもったグラフの一例を17図に示す．しかし外線につながっていない部分は，丁度 $\langle\Phi_0|U(t_2'-t_1')|\Phi_0\rangle$ を与えるグラフにあたるので，一本の外線をもったつながったグラフの和は



17図 一本の外線をもつ，つながっていないグラフ

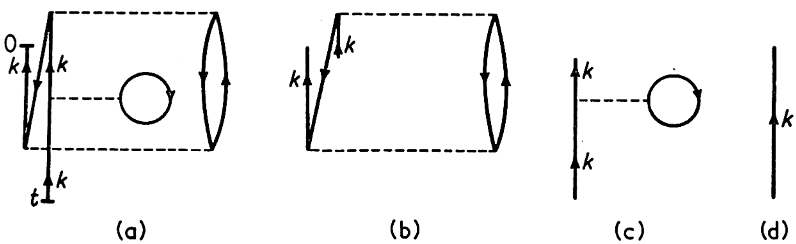
$$\langle\Phi_0|U(t_2'-t_2)a_kU(t_2-t_1)a^\dagger_kU(t_1-t_1')|\Phi_0\rangle/\langle\Phi_0|U(t_2'-t_1')|\Phi_0\rangle$$

を与えられることになる．例によって，$-t_1'$ と t_2' の虚数部分を$-\infty$にもってゆくと，上の分数は

$$\langle \Psi_0 | \exp(iHt_2) a_k \exp[iH(t_1-t_2)] a^\dagger_k \exp(-iHt_1) | \Psi_0 \rangle$$

に近づくが，これは丁度 (5.3) で定義した グリーン関数の おくれた部分である．進んだ部分も同様に計算できる．ちがうのは，外線がグラフに入る点は外線がグラフから出る点よりも上にあるという点だけである．13図のグラフはおくれた部分を，14図のグラフは進んだ部分を与える．

この計算はさらに簡単にすることができる．ある種のグラフは一本のフェルミ線を切断することで，二つの部分にわけることができる．たとえば18図 (a) のようなグラフは，18図の (b) と (c) に示したような二つの部分に分けられる．唯二本のフェルミ線だけで，残りのグラフとつながっているような部分を **自己エネルギー部分** (self energy part) と呼ぶことにする．この名前は場の理論で Dyson (1949b) が導入したものである．このように分離できる自己エネルギー部分を含まないグラフを **結ばれた** (connected) グラフと呼ぶ．18図の (a) は二つの結ばれた部分に分けられる．



18図　(a) に示されたグラフは，(b) と (c) に示されたような二つの，結ばれた自己エネルギー部分に分割される．一粒子グリーン関数に寄与する最も簡単なグラフは (d) に示されたものである．

p. 67
グラフ上を外線を追って，それが時刻 t でグラフに入った点から，時刻 0 にグラフを出る点までたどってみよう．この線に沿っては，全然相互作用がないか，あるいは線に沿っての最後の相互作用がどこか t' という時刻でおこるかのどちらかである．第一の場合には，グラフは 18図(d) で示されたも

のになり，それからの寄与は方程式 (4.28) と (4.29) で定義された無摂動伝播関数 $S_k^{(0)}(t)$ のみになる．グラフの中にいくつかの相互作用が含まれている場合には，少くとも一つ以上の結ばれた自己エネルギー部分があるはずで，その中の最後の結ばれた自己エネルギー部分は t'' にはじまり t' に終るとする．t''はその自己エネルギー部分で最初に相互作用が現われる時刻，t' は最後に現われる時刻である．なお，フェルミ線は時間を逆にたどることもできるから，最初の相互作用が最後の相互作用より後の時刻におこるということもあり得る． t'' にはじまり，t' で終るすべての結ばれた部分の和を $\Sigma_k(t''-t')$ としよう t と t'' の間には $S_k(t-t'')$ に寄与するあらゆるグラフがおこり得る．それゆえ，最後の結ばれた部分が t'' から t' までであるようなすべてのグラフからの寄与は

$$S_k^{(0)}(t')\Sigma_k(t''-t')S_k(t-t'')$$

で与えられる． t'' と t' はどこにとってもよいから，$S_k(t)$ に対する積分方程式として

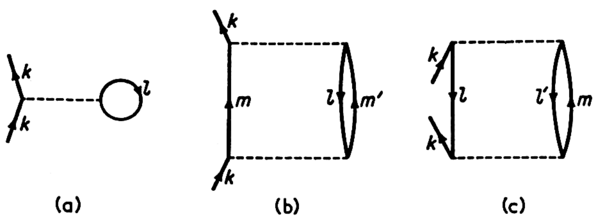
$$S_k(t)=S_k^{(0)}(t)+\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}S_k^{(0)}(t')\Sigma_k(t''-t')S_k(t-t'')dt'dt'' \quad (5.24)$$

を得る．この式のフーリエ変換をとり， (4.28) と (4.29) を使うと次の式が得られる．

$$S_k(z)=(T_k-z)^{-1}-(T_k-z)^{-1}\Sigma_k(z)S_k(z),$$

$$S_k(z)=[T_k+\Sigma_k(z)-z]^{-1} \quad (5.25)$$

$\Sigma_k(z)$を計算するためには，まず外線 k をもった，すべての結ばれた自己エネルギー部分のグラフを画く．個々の結ばれたグラフからの寄与を求める



19図 一次および二次の結ばれた自己エネルギー部分

p. 68
には第Ⅳ章5節の規則を適用する．ただし外線の両端は運動エネルギーが z（T_k でなくて）の線でつないでおく．この余分の線はいつも空孔線として扱い，(−1) の因子を与えておく．この規則に従うと，19図に示した一次および二次のグラフの寄与はそれぞれ

$$\frac{1}{2}V_{kl,kl},$$

$$\frac{1}{4}|V_{kl,mm'}|^2(z+T_l-T_m-T_{m'})^{-1},$$

および

$$-\frac{1}{4}|V_{ll'km}|^2\ (T_l+T_{l'}-z-T_m)^{-1}$$

となる．したがって二次の摂動論では $\Sigma_k(z)$ は次の形になる．

$$\begin{aligned}\Sigma_k^{(2)}(z)=&\sum_{l<K_F}(V_{kl,kl}-V_{kl,lk})\\&+\frac{1}{4}\sum_{l<k_F}\sum_{m,m'>k_F}|V_{kl,mm'}-V_{kl,m'm}|^2(z+T_l-T_m-T_{m'})^{-1}\\&-\frac{1}{4}\sum_{l,l'<k_F}\sum_{m>k_F}|V_{ll',km}-V_{ll',mk}|^2\,(T_l+T_{l'}-z-T_m)^{-1}\end{aligned}\qquad(5.26)$$

19図 (a) に示された一次の グラフは， 第Ⅳ章6節で議論したように，丁度ハトリー・フォックの ポテンシャルを与える． 二次のグラフは， z 依存性があるので伝播関数の形を変化させ，このことはいくつかの重要な効果をもたらす．この点を最もたやすく議論するには， (5.21) で定義した強度関数を使うのがよい．

強度関数は，グリーン関数の変数を実軸に上から近づけたときの，グリーン関数の虚数部分の極限値をとると得られる． (5.26) 式の右辺の第一項だけを考えると，強度関数は $z-T_k-\Sigma_l(V_{kl,lk}-V_{kl,lk})$ の δ-関数になる．第二項および第三項は実軸の近傍で正の虚数部分をもっているので強度関数の振舞を変える，したがって (5.25) 式の分母は決して消えないで，強度関数は発散しない関数になる．z と $\Sigma_k(z)$ の虚数部分は反対の符号をもち，それゆえ $S_k(z)$ はこの近似で実軸を除く すべての点で 正則であることに注意しよう．このことから分散公式 (5.20) または (5.23) が成り立ち (5.22) 式も
p. 69
成立することがわかる．(5.4) あるいは (5.10) の総和則を用いるには，伝

播関数の進んだ部分を知る必要がある．それには (5.24) 式を利用するのが一番よいが。容易に知れるように，自己エネルギーの進んだ部分およびおくれた部分の両方が，伝播数の進んだ部分に寄与する．これらの問題は Prange と Klein (1958) および Thouless (1959) によって詳細に分析された．

系の励起状態を調べるのに，このような方法を使うことが有利である理由の一つは，グリーン関数が基底状態と励起状態のエネルギー差を与えることである．基底状態のエネルギーを非常に正確に求め，次に励起状態のエネルギーから基底状態のエネルギーを引いて励起エネルギーを出すといった過程は必要でない．展開式の中から，外線につながらないグラフを落してしまうところが，この長所を産みだす上で理論のつぼになっている．無限大の系では，これは非常に重要である．なぜならば，基底状態のエネルギーは系のひろがりに比例するけれども，われわれが興味をもつのは，系の全エネルギーとは無関係な，ある一定量のエネルギーで励起された状態だからである．しかしこの外線につながらないグラフを除去するという操作は，疑いもなく摂動級数の収束をずっと悪くしている．というのはこの操作はある数，すなわち変換関数 U の期待値で割ることであるがこの期待値は結合定数がかなり小さい値に対して零点をもつ可能性が大きいからである．実際 (5.25) 式を $z=T_k$ の近傍で相互作用のべきに展開すると，級数は収束しないことは明らかである．だが，求まった表式は，それを導くのに使った方法が成立つ範囲よりも広い範囲で妥当であると期待される．このことはある場合には証明できるが，しかしやはり上に議論した導出方法を一般に厳密なものとはみなせないのである．

4. 光学模型

中性子または陽子の原子核による弾性散乱は，原子核がポテンシャルの井戸のように振舞うとする光学模型で充分計算できる．実際には非弾性散乱がおこるので，ポテンシャルは虚数部分をもたなければならない．基底状態の原子核による粒子の弾性散乱は (5.3) で定義した一粒子グリーン関数のお

くれた部分によって明確に記述できる．すなわち，余分の粒子が演算子 $a^{\dagger}_{k}$ によって作られ，グリーン関数はその粒子が伝播するしかたを記述する．最初にわれわれはこの余分の粒子が，一様な核物質中を伝播す模様を考えよう．

もし核物質の核子に対する効果が，小さい虚数部分をもったポテンシャルからの効果と同じであるとすると，核子は減衰平面波のように伝播するはずである．その波数を m，振動数を $(T_m+V_m)/\hbar$，減衰率を $\Gamma_m/\hbar$ としよう．

p. 70

するとグリーン関数は

$$S_m^{(r)}(t)=\exp[i(T_m+V_m-i\Gamma_m)t], \qquad t<0 \tag{5.27}$$

となり，そのフーリエ変換は

$$S_m^{(r)}(z)=(T_m+\mathrm{V}_m-i\Gamma_m-z)^{-1} \tag{5.28}$$

となる．真のグリーン関数は実軸以外で解析的で (5.17) 式をみたし，実軸上 $z=\mu(N)$ より小さいところで実のおくれた部分を持つはずなので，上の式は厳密ではありえない．しかし (5.21) によって，この表式の虚数部分は実軸上で強度関数を与え，それは次の形である．

$$g_m(x)=\Gamma_m/\pi[(T_m+V_m-x)^2+\Gamma_m^2]. \tag{5.29}$$

この強度関数と，分散公式を使って，すべての正しい性質を具えたグリーン関数を作ることができる．もし (5.27) が t のかなり大きい負の値に対して正しいとすると，真の強度関数は $x=T_m+V_m$ の近傍で (5.29) の形を持たなければならない．もし減衰が小さいと，強度関数は T_m+V_m の附近で鋭い山をもった関数になる．

前節の計算から，もし摂動論の最初の二次までの結果が正しいとすると，グリーン関数は実際上の関数に似た振舞いをする．(5.26) 式の右辺の第一項は V_k にだけ寄与し平面波を減衰させない．他の二つの項は $\Sigma_k(z)$ に対し z に依存する実数部分と虚数部分を寄与する．虚数部分は相互作用の二次の効果なので，相互作用がそれほど強くない場合は虚数部分はかなり小さくなる．また z がフェルミ・エネルギーに近いと一層小さくなる．というのはこの場合，(5.26) 式のエネルギー分母を 0 にするような l, m, m' また

は l, l', m の組み合わせは，ほんのわずかしかないからである．それゆえ強度関数が大きくなるのは，$T_k+\mathrm{Re}\Sigma_k(x)-x$ が 0 に非常に近い場合のみと考えられる．$T_k+\mathrm{Re}\Sigma_k(x)-x$ が 0 になるときの $\Sigma_k(x)$ の値を V_k と定義すると，V_k は次の方程式をみたす．

$$V_k=\mathrm{Re}\Sigma_k(x_0), \quad x_0=T_k+V_k. \tag{5.30}$$

この近傍では，強度関数は近似的に (5.29) によって与えられるはずである．ただし減衰は

$$\Gamma_m=\mathrm{Im}\Sigma_m\ (T_m+V_m) \tag{5.31}$$

となり，グリーン関数はあたかも $z=T_m+V_m-i\Gamma_m$ に極をもつように振舞う．この極は上半面にはなくて，そこに達するには，16図に示された右側の切断を横切って解析接続を行なわなければならない．k がフェルミ面に近い時，Γ_k は非常に小さく，実際 Hugenholtz (1957) によって示されたように，この附近では $(k-k_F)^2$ に比例する．しかしフェルミ面に近い k に対してでも，$\Sigma_k(z)$ は z に依存し，この z-依存性が極 $z=T_k+V_k-i\Gamma_k$ における留数を 1 よりいく分小さくする．(Thouless 1959)．言いかえると，フェルミ面に近い運動量をもつ粒子は，$\mu(N)$，すなわち平衡状態にある系に一粒子つけ加えることにより得られるエネルギーの附近に鋭い山のあるエネルギー分布をもち，この分布は高エネルギー側にすそを引いている．

この核物質の模型を使って，実際の原子核による核子の散乱を記述することができる．核子は系の外から正のエネルギーをもってとび込み，核密度が変化する表面領域を通り抜け，一定密度をもった中心領域に同じエネルギーのままで到着する．エネルギーと運動量の間の関係は，(5.30) で定義されたポテンシャル・エネルギー V_k があるため，自由空間と核物質の中とでは異なる．したがって核子の運動量は，核子が原子核の表面を通過する間に増加しなければならない．Brueckner と Gammel (1958a) による核物質中の粒子のポテンシャル・エネルギーの計算と，中性子，陽子散乱の実験資料の分析結果との比較がなされているが，その比較は詳細にはわたつっていない．ポテンシャル・エネルギーは，Brueckner 達 (1960a) により計算された (4.48) で

定義される配置がえのエネルギーを含むはずである．この線に沿ってのポテンシャルの虚数部分の計算が Shaw (1959) によってなされた．この仕事から導かれた最も重要な結論は，吸収の大部分は表面でおこるということである．なぜなら，密度の低いところでは，初期状態と同じエネルギーをもつ状態がより沢山あるからである．『Ripka (1963) は核子—核子間の力を固い芯のない Yukawa 力と仮定して，核物質中の光学ポテンシャルの計算を行なった．そして約 10^{-13}cm の範囲におよぶ著しい非局所効果があることがわかった．』

原子核による核子の散乱に対するこの模型は，原子核の表面の核密度の変化が適切に考慮されていないのであまり信頼できない．表示の基底として，平面波の代りに殻模型波動関数を使って同じような議論ができる．特別の殻模型状態にある一つの核子を，原子核の基底状態につけ加えると，得られる状態はハミルトニアンの固有状態の混合したものであり，固有値の分布は強度関数によって与えられる．強度関数がある値で鋭い山をもつ場合には，光学模型はよい近似になり，その山の幅はポテンシャルの虚数部分と関係がある．光学模型に対するこの方法の詳細な議論は Brown (1959) によって与えられた．『有限の核に対する光学ポテンシャルをどう定義するかについて注意深い議論が Bell (1962) の論文に与えられている．』

5. フェルミ流体

絶対密度で液体である物質は二つしかなくて，それらはヘリウムの二つの
p. 72 同位元素 He^3 と He^4 である．これらがこの温度で液体であるということは，量子力学的効果にちがいない．というのは，固体になるのを防げているものは，原子の零点運動だけだからである．この二つの同位元素の間には著しい相異がある．すなわち He^3 は 0.1°K まで正常流体として振舞うのに対して，天然の He^4 は 2.2°K で超流体になる．He^4 の超流動性は，第IX章でみるように，原子がボーズ粒子であるという事実によっているようである．He^3 の原子はスピン ½ のフェルミ粒子であり，液体 He^3 に対する波動関数の反対

称性は，液体 He^4 に対する波動関数の対称性と同じ程度に重要であることが予想される．

フェルミ流体の理論は，液体 He^3 を理論的に記述する目的で，Landau (1956) により展開された．この理論の基本的な仮定は，相互作用しているフェルミ粒子系の励起スペクトルが，相互作用のないフェルミ粒子系の励起スペクトルと同じ形をもつということである．基底状態にある相互作用のないフェルミ粒子系を励起する最も簡単な方法は，フェルミ面の下から粒子を一つ取り，フェルミ面上の準位におくこと，すなわち別の言葉で言えば，一つの粒子と一つの空孔を作ることである．フェルミ流体の理論の仮定は，粒子間の相互作用を入れても，この励起スペクトルの形は変らないとすることである．簡単な励起状態は，相互作用があってもやはりある準位へ粒子を一つ加えることによって，あるいはある準位から粒子を一つ取去ることによって記述される．相互作用の結果として，媒質の残りの部分は，加えられた（または取除かれた）粒子に影響をおよぼし，そのため励起状態の波動関数は，単に一粒子波動関数と基底状態波動関数の積でなく，余分の(または不足の)粒子と媒質との間の相関を含んでいる．この理由から，励起は**準粒子** (quasiparticle) をつけ加える（または取除く）ことと考えられる．準粒子は一定のスピンと運動量をもち，各準位には準粒子が一つしか入れない．準粒子準位はフェルミ運動量まですべてみたされ，フェルミ運動量は相互作用によって変わらないと仮定するので，準粒子の数はもとの粒子の数に等しいことになる．準粒子励起は不安定で，ある時間がたつと崩壊してしまう．

これらの仮定は，前節で議論した光学模型の仮定と非常に似ている．準粒子は光学模型における独立粒子に対応し，グリーン関数はフェルミ面より上の状態に対しては

$$S_m(t)=\exp\{i[\epsilon(m)-i\Gamma(m)]t\}. \qquad t<0 \qquad (5.32)$$

の形になり，フェルミ面より下の状態に対しては

$$S_l(t)=-\exp\{i[\epsilon(l)+i\Gamma(l)]t\}, \qquad t\geq 0 \qquad (5.33)$$

p. 73
の形をとるものと仮定されている．われわれは摂動論により，この仮定があ

る近似の下に正しいことを示した.

真の基底状態は，場の理論における物理的真空に対応し，準粒子状態は場の理論の物理的粒子に対応することに注意しよう．準粒子の伝播関数は，摂動論において，外線につながったすべてのグラフの和によって与えられる．フェルミ流体における普通の物理的粒子は，場の理論の裸の粒子に対応する．

準粒子のエネルギーは，準粒子の密度を変えた時の系の単位体積あたりのエネルギーの変化

$$\delta E=(8\pi^3)^{-1}\sum_{\sigma}\int \epsilon(k)\ \delta n(\mathbf{k},\sigma)d^3k \tag{5.34}$$

を用いて定義される．ここで $\delta n(\mathbf{k},\sigma)$ は運動量 $\mathbf{k}$，スピン σ をもった準粒子の密度の変化である．準粒子のエネルギーは運動量のなめらかな関数で，フェルミ面の近くで

$$\epsilon(k)=\mu+\hbar^2(k^2-k_F^2)/2M^* \tag{5.35}$$

のように振舞う．$\epsilon(k_F)$ は平衡状態を乱さずに一粒子を加えるのに必要なエネルギーであるから，μ は化学ポテンシャルを表わす．また M^*は有効質量として知られている．

準粒子のある特定の分布をもった状態のエントロピーは次のようになる．

$$S=-(8\pi^3)^{-1}\sum_{\sigma}\int\{n(\mathbf{k},\sigma)\log n(\mathbf{k},\sigma)+[1-n(\mathbf{k},\sigma)]\log[1-n(\mathbf{k},\sigma)]\}d^3k. \tag{5.36}$$

エントロピーは，分布の統計的重みだけに関係するので，(5.36)式は相互作用のない粒子に対する式と同じ形である．それゆえエントロピーは考えている粒子が普通の粒子であるか，準粒子であるかにはよらない．これらの式から，極低温における熱力学的諸性質を計算することができる，比熱は温度に比例し，比例定数は有効質量と密度のみを含む．『Anderson 達 (1963) の測定によれば，低温比熱は有効質量が むしろ He^3 原子の質量の二倍以上であることを示している．』

理論にあらわれる他の関数は，本質的に全エネルギーの状態占有数に関す
p. 74 る二次の導関数である．(5.34) 式から，$\epsilon(\mathbf{k},\sigma)$ の平衡値からのはずれが，

平衡状態における値と次の式で関係づけられることがわかる.

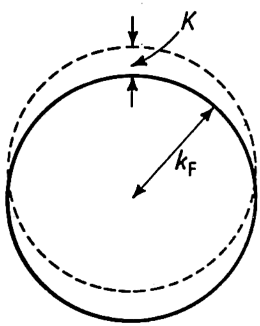
$$\epsilon(\mathbf{k},\sigma)=\epsilon_0(k)+(2\pi)^{-3}\sum_{\sigma'}\int f(\mathbf{k},\sigma;\mathbf{k}',\sigma')\,\delta n(\mathbf{k}',\sigma')d^3k', \qquad (5.37)$$

ここで $f(\mathbf{k},\sigma;\mathbf{k},\sigma')$ がこの二次の導関数である. 勿論これは

$$f(\mathbf{k},\sigma;\mathbf{k}',\sigma')=f(\mathbf{k},\sigma';\mathbf{k},\sigma) \qquad (5.38)$$

をみたさねばならない. 他のすべての高次の導関数はこの理論では無視される.

この関数と有効質量を結びつける重要な総和則がある. フェルミ面を, 20図に示すように, その大きさと形を変えずに小さい量 $\mathbf{k}$ だけずらしたとしよう. これは全流体に速度 $\hbar\mathbf{k}/M$ を与え, また加えられた運動エネルギーとして, エネルギーは $\rho\hbar^2K^2/2M$ だけ増加する. ただし ρ は粒子密度である. 粒子間の相対運動は変らないから, ポテンシャル・エネルギーには変化はおこり得ない. このエネルギー変化は (5.34) 式と (5.37) 式からも求められ, したがってエネルギーに対する方程式は次の形になる.



20図　フェルミ面の微小変位

$$\rho\hbar^2K^2/2M=(2\pi)^{-3}\sum_{\sigma}\int\epsilon_0(k)\delta n(\mathbf{k},\sigma)d^3k$$
$$+\frac{1}{2}(2\pi)^{-6}\sum_{\sigma}\sum_{\sigma'}\iint\delta n(\mathbf{k},\sigma)f(\mathbf{k},\sigma;\mathbf{k}'\,\sigma')\delta n(\mathbf{k}'\sigma')d^3kd^3k'. \qquad (5.39)$$

20図によると, $\delta n(\mathbf{k},\sigma)$ はフェルミ面に接した厚さ $K\cos\theta$ の領域で ± 1 に等しい. (5.39) 式の第一項は $\rho\hbar^2K^2/2M^*$ を与える. 第二項には k_F に非常に近い k の値だけが含まれるので, この領域では f の $\mathbf{k},\mathbf{k}'$ 依存性を無視しても差支ない. すると方程式は次の形に書き変えられる.

$$1/M=1/M^*+(k_F/8\pi^2\hbar^2)\sum_{\sigma}\sum_{\sigma'}\int_{-1}^{1}f_{\sigma\sigma'}(\cos\theta)\cos\theta\;d(\cos\theta). \qquad (5.40)$$

ここで $\mathbf{k},\mathbf{k}'$ がともにフェルミ面の上にある場合の $f(\mathbf{k},\sigma;\mathbf{k},'\sigma')$ の値を

$f_{\sigma\sigma'}(\cos\theta)$ と書いた. θ は $\mathbf{k}$ と $\mathbf{k}'$ の間の角度である.

p. 75

種々の他の物理的性質も簡単な関係で関数 $f_{\sigma\sigma'}(\cos\theta)$ と結びつけられる. これらについては Abrikosov と Khalatnikov (1959) の総合報告の中で議論されている. たとえば低温における帯磁率は, この関数のスピン依存性によりきめられる. 粘性とか熱伝導度のような他の性質は準粒子の寿命に関係する. 前節に述べた議論から, 絶対零度における準粒子の寿命は, フェルミ面からの距離の二乗に反比例することが予想される. フェルミ面近傍の準粒子の寿命は温度 T の時, T^{-2} に比例する. これはフェルミ面附近の運動量空間で準位が部分的にみたされている領域の幅が T に比例することから結論される. 『理論との一致を得るためには, 0.1°K 以下にする必要があるように思われる. Anderson 達 (1961a) による熱伝導の測定, および Anderson 達 (1961b) による自己拡散の測定は、予想された振舞を示し, 種々の実験結果と理論の比較が, Hone (1962) によってなされた. 低温における粘性は Betts 等 (1963) によって測られたが, この測定も理論と大体一致している.

Luttinger と Nozières (1962) は相互作用するフェルミ粒子系の摂動論から Landau のフェルミ流体の理論を導いた. この仕事については Nazières (1962) の著書に記述されている.』

6. 音波と零音波

フェルミ流体の理論から予想されることの中で最も興味あるものの一つは, 極低温における音の伝播に関するものである. 液体の大きい体積を小さい細胞に分割し, 細胞の各々には非常に多数の原子が含まれるようにしたとする. これらの細胞の一つ一つにおける準粒子の分布を考えることができる. 媒質の中に何かの週期的な乱れがあって, 乱れは一つの細胞から隣の細胞へと除々に変っているとしょう. もし乱れの周期が準粒子の寿命よりもずっと長いと, 各細胞の中では平衡状態が成り立っていて, 局所的な速度と密度とによってすべてが記述される. この場合, 音波は普通のしかたで圧縮率によっ

てきまるある速さ c で伝播する．われわれは次の関係式を用いることができる．

$$c^2=\frac{1}{M}\frac{\partial p}{\partial\rho}=\frac{\partial p}{\partial\mu}\,\frac{1}{M}\,\frac{\partial\mu}{\partial\rho}=\frac{\rho}{M}\,\frac{\partial\mu}{\partial\rho}. \tag{5.41}$$

μ は化学ポンシャルで，$\epsilon(k_F)$ に等しい．粒子の密度が増し，フェルミ面が球形のまま拡大したとすると，次の式が得られる．

$$\rho=k_F^3/3\pi^2,$$
$$\delta\rho=k_F^2\delta k_F/\pi^2. \tag{5.42}$$

(5.35) 式と (5.37) 式を使って μ の変化が計算でき，次のようになる．

$$\begin{aligned}\delta\mu&=\frac{d\epsilon_0(k)}{dk}\delta k_F+(2\pi)^{-3}\sum_{\sigma'}\int f(k_F,\sigma;\,k',\sigma')\,\delta\eta(k',\sigma')\,d^3k\\&=\hbar^2k_F\delta k_F/M^*+(2\pi)^{-2}k_F^2\delta k_F\sum_{\sigma'}\int_{-1}^{1}f_{\sigma\sigma'}(\cos\theta)\,d(\cos\theta),\end{aligned} \tag{5.43}$$

p. 76
(5.42) 式と (5.43) 式を (5.41) 式に代入し，(5.40) 式で与えられた M^* の値を用いると

$$c^2=(k_F^2/3M^2)(1+F_0)\Big/\left(1+\frac{1}{3}F_1\right) \tag{5.44}$$

が得られる．ここで $f_{\sigma\sigma'}(\cos\theta)$ のスピン平均を Legendre の多項式で展開した式

$$\frac{1}{2}\sum_{\sigma'}k_FM^*f_{\sigma\sigma'}(\cos\theta)/\pi^2\hbar^2=\sum_n F_nP_n(\cos\theta) \tag{5.45}$$

を用いた．低温における比熱から F_1 がきまるので，あとは低温における音速の測定から F_0 がきめられる． Laquer と彼の協同研究者達 (1959) の測定によれば，低温における音速度は 183m/sec で，これを使うと，F_1 が 3,0 の時 $F_0=7.6$ になる．

振動数が高くなるか，温度が低くなると，準粒子の寿命は終には振動数と同程度の大きさになり平衡状態に達するひまがなくなる．したがってそのような状態では音波は減衰してしまう．非常に高い振動数の時にも，乱れは伝播するけれども，それは局所平衡でないから，この伝播は音波のようなものではない．もし粒子が全然相互作用しないとすると，どんな乱れも速度 $k_F/$

M で伝播する．というのは，これが自由に動ける粒子の速度であるから．これに対して，相互作用が0に近づいた極限の音速は，(5.44) 式で $F_0=F_1=0$ とおくことにより得られ，$k_F/\sqrt{3}M$ となる．極低温または高周波の下で伝播する乱れを**零音波** (zero sound) と呼ぶ．

零音波の速度は，運動論的方程式

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\frac{1}{\hbar}\frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}}\cdot\frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{k}}-\frac{1}{\hbar}\frac{\partial n}{\partial \mathbf{k}}\cdot\frac{\partial \epsilon}{\partial \mathbf{r}}=I(n) \tag{5.46}$$

を使って導くことができる．左辺の第一項は一つの細胞中の準粒子の分布の変化を与え，第二項は準粒子が速度 $\partial\epsilon/\partial\mathbf{k}$ で一つの細胞から別の細胞へ移動することによる変化を与える．第三項は準粒子に作用するポテンシャルの勾配に基づく準粒子の運動量変化を与える．右辺は衝突による変化を与えるが，今は準粒子の寿命は長いと仮定しているので，この項は無視する，この方程式の週期的な解が求められればよいので，次の形の解をためしてみよう．

$$n(\mathbf{k}\sigma)=n_0(\mathbf{k},\sigma)+\delta n(\mathbf{k}\sigma)\exp[i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)] \tag{5.47}$$

p. 77

(5.46) 式において δn について一次の項だけとると

$$\left(-\omega+\frac{1}{\hbar}\mathbf{q}\cdot\frac{\partial\epsilon}{\partial\mathbf{k}}\right)\delta n(\mathbf{k},\sigma)$$
$$-\frac{1}{\hbar}\frac{\partial n_0}{\partial\epsilon}\frac{\partial\epsilon}{\partial\mathbf{k}}\cdot\mathbf{q}(2\pi)^{-3}\sum_{\sigma'}\int f(\mathbf{k},\sigma;\mathbf{k}',\sigma')\delta n(\mathbf{k}',\sigma')d^3k'=0 \tag{5.48}$$

が得られる．これを解くのに次のようにおく．

$$\delta n(\mathbf{k},\sigma)=(\partial n_0/\partial\epsilon)\nu_\sigma(\theta,\varphi). \tag{5.49}$$

ここで θ と ϕ は $\mathbf{q}$ の方向から測った $\mathbf{k}$ の極座標である．低温では，$\partial n_0/\partial\epsilon$ は殆んど負の δ 関数に等しく，$\partial\epsilon/\partial\mathbf{k}$ の大きさは $\partial n_0/\partial\epsilon$ が無視できないところでは $\hbar v_F=\hbar^2k_F/M^*$ にとれる．乱れの速度 ω/q を u とすると次の関係式が導かれる．

$$(u-v_F\cos\theta)\nu_\sigma(\theta,\varphi)=(2\pi)^{-3}k_F^2\cos\sum_{\sigma'}\int f_{\sigma\sigma'}(\cos\chi)\nu_\sigma(\theta',\varphi')d\Omega'. \tag{5.50}$$

χ は (θ,φ) と (θ',φ') の間の角度である．

$f_{\sigma\sigma'}(\cos\theta)=\pi^2\hbar^2F_0/M^*k_F$ となるような簡単な場合には，(5.50) 式から

$\nu_\sigma(\theta,\varphi)$ が $v_F\cos\theta/(u-v_F\cos\theta)$ に比例することが示される．これを (5.50) 式の右辺に代入すると $s=u/v_F$ に対する方程式

$$\cos\theta=\frac{1}{2}F_0\cos\theta\int_{-1}^{1}\cos\theta(s-\cos\theta)^{-1}d(\cos\theta),$$

$$F_0^{-1}=\frac{1}{2}\log^{[(s+1)/(s-1)]-1}$$

が得られる．自由粒子の場合この方程式は $s=1$ を与え，従って u は v_F，すなわち音速の $\sqrt{3}$ 倍に等しい．F_0 が正ならば常に解が存在し，大きい F_0 に対してその解は $u=v_F=\sqrt{F_0/3}$ に近づく．これは (5.44) で与えられた音速と一致する．

f がもっと複雑な形をとると，(5.50) は一層複雑になり，多くの異なった型の解が可能になる．もし解 $\nu_\sigma(\theta,\varphi)$ がスピンによらなければその乱れは零音波と呼ばれ，もしスピンによるならばその乱れをスピン波と呼ぶ．Abrikosov と Khalatnikov (1959) はこの方程式を調べて，He^3 中にはスピン波は多分存在しないであろうが零音波は存在するはずだという結論に到着した．彼らは零音波を観測するのに必要な振動数は 0.1°K で 10^{10} cycles/sec 以上と見積っている．

零音波が観測されると，それはフェルミ流体の Landau 理論の満足すべき検証を与えることになるだろう．極低温において He^3 に関して測定される量の数より，理論中の自由にきめられるパラメーターの数の方が多いので，理論を決定的に確証するための他の方法を考え出すのはむつかしい．『Keen 達 (1963) による液体 He^3 の振動数 10^9c/s の音波に対する音響インピーダンスの測定は，0.09°Kで不連続性を示し，これは通常音波と零音波の間の可能な転移によるものと解釈されている．』

7. 集 団 運 動

フェルミ流体中の音波と零音波について少し詳しく議論したのは，それらが二つの異なった型の集団運動だからである．われわれの記述は次のいみで巨視的であった．すなわち，われわれは準粒子の分布が空間的にどのように

変るかを考えただけで，個々の準粒子に何がおこるかは考慮しなかった．集団運動は量子化されねばならないが，その量子化された理論がどのような形をとるかを推測するのは困難ではない．音波も零音波も振動の形をしているので，振動の各モードが調和振動子のように量子化されると考えられる．速度 c，波数 q をもった音波の量子，すなわちフォノンは，エネルギー $\hbar cq$ をもち各モードから流体の基低状態に対し，零点エネルギー $\frac{1}{2}\hbar cq$ だけの寄与がある．後に示すように，零音波の量子は第一近似で平衡状態にある準粒子の一つに余分の運動量 $\hbar q$ を与えることによって得られる状態を一定の位相関係によって重ね合わせたものである．フェルミ流体における普通の音波は，零音波のように簡単に準粒子の励起を使って記述することはできない．というのは普通の音波が存在するのは，準粒子の寿命が比較的短いことと関係しているからである．

多フェルミ粒子系の理論で興味のあるいろいろの型の集団運動がこの他にも多数存在する．そのような集団運動の最も簡単な例は，相対運動を不変に保った重心運動である．不変性の原理がこの運動に関しわれわれの必要とするすべての情報を与える．質量 NM をもつ自由な系で質量中心に相対的な粒子の運動には何の変化も与えず，その質量中心の運動量を 0 から $\hbar K$ まで変えたとき，系のエネルギーは明らかに $\hbar^2K^2/2NM$ だけ増す．これは自明の結果であるが，いかなる集団運動理論でもそれが正しいかどうかを調べるのに役立つ．この問題に適用した時正しい解を与えないような方法は，他の問題に適用したときも信頼することはできない．

これよりもっと面白い型の集団運動は，原子核物理にあらわれる．集団的なモードの存在は普通原子核を液滴とみなす〝巨現的〟な考察から帰納される．核物質は容易に圧縮できないので，原子核の圧縮を含むようなモードのエネルギーは，非常に高くなるが，液滴の表面は液体を圧縮することなくその平衡位置附近で振動できる．振動の振幅の角依存性は球面調和関数の和の

p. 79

形で表わされる．球形の平衡位置のまわりの微小振動に対しては，異なった調和関数は結合しない．各の球面調和関数は振動の異なったモードに対応し，

この場合も量子化の方法は自明である．球面調和関数の次数は量子化された振動系の第一励起状態の（$\hbar$ の単位で測った）角運動量を与える．0次の調和関数（脈動モード）は液滴の体積変化を表わすので普通現われない．一次の調和関数（双極子型）は液滴の単なる並行移動を表わすから真の振動ではない．しかし高次のものはすべておこる．原子核で最も興味のある振動状態は四重極子振動（二次の調和関数）および八重極子振動（三次の調和関数）である．これは最初 Bohr と Mottelson (1953) により論じられた．

他の型の集団運動は非球対称的な原子核でおこる．球形の原子核は回転してもその波動関数を変えないので回転できないが，回転楕円体の原子核は対称軸に垂直な軸の周りに回転することができる，軸対称的な剛体の回転が量子化されると，そのエネルギー準位は

$$E-E_0=\hbar^2 J(J+1)/2\mathcal{I} \tag{5.52}$$

となる．J は角運動量，$\mathcal{I}$ は慣性能率である†．原子核はその中心に関して対称なので，J は偶数でなければならない．このような準位が原子核の中で実際に存在することは Bohr と Motlelson (1953) によって示された．

第三の型の集団運動は Goldhaber と Teller (1948) によって示唆された．この型の運動では，陽子間，中性子間には相対的運動がなく，陽子と中性子が相対的に振動している．この振動の振動数は非常に高いので，最初の励起状態だけが興味の対象になる．この双極子状態は電磁波によって基底状態から強く励起されるはずで，これがいわゆる〝巨大双極子共鳴″と呼ばれ中位あるいは重い原子核に観測されている高エネルギー光子のするどい吸収を説明する．

集団運動の形式的量子力学的な扱いは，上にのべたような運動の簡単な物理的な描像に基礎をおいている．集団運動を扱う非常に便利な量子論が Tomonaga (1955a) によって提案された．『これは Bohm と Pines (1953) により発展させられた方法の一つの一般化である．』N粒子系を記述する変数

† L. Landau & E. Lifshitz: Quentum Mechanics (Addison-Wisley, Reading, Maseachusetts, 1958) pp. 373–376 参照

として，$3N$個の座標と，$3N$個の運動量をとる．重心運動の場合は，質量中心の全運動量と座標を，他の変数から分離された変数として含むような新しい変数の系に変換することができる．この三つの運動量と三つの座標が**集団変数**（collective variables）であり，残りの$3N-3$個の運動量と座標は**内部**
p. 80
変数（internal variables）と呼ばれる．この新しい変数の組はもとの組がみたすのと同じ交換関係をみたさなければならない．内部変数が集団変数に直交している場合には，ハミルトニアンは重心（集団）変数のみを含む部分と内部変数のみを含む部分との二つの部分にわけられることがわかっている．

他の型の集団運動に対しては，問題はもっと複雑である．なぜならハミルトニアンが集団運動部分と内部運動の部分とに完全に分離できると信じられる根拠がないからである．われわれはこれら他の型の集団運動の存在を，不変性の原理からでなくて，系の簡単な物理的な描像から帰納することになる．Tomonaga によって提案された方法は，われわれが調べている集団運動のモードに対応する集団運動量 π を推定する方法である． 彼は例として，円形の二次元液滴の四重極子振動を考え，これに対する π として

$$\pi=-i\hbar\sum_{n=1}^{N}\left(x_n\frac{\partial}{\partial x_n}-y_n\frac{\partial}{\partial y_n}\right) \tag{5.53}$$

を与えている．この運動量はすべての内部座標と可換でなければならない．また集団座標 ξ はすべての内部座標と直交しなければならない． 適当な集団座標として

$$\xi=(NR_0^2)^{-1}\sum_{n=1}^{N}(x_n^2-y_n^2) \tag{5.54}$$

をとる．ここでR_0は定数である．π と ξ の間の交換関係は次式で与えられる．

$$[\pi,\xi]=-i\hbar(NR_0^2)^{-1}2\sum_{n}(x_n^2+y_n^2). \tag{5.55}$$

もし π と ξ が真の正準変数ならば，それらの交換子は $-i\hbar$ になるはずである．系の中に非常に多くの粒子があると，$\Sigma_n(x_n^2+y_n^2)$ はその平均値からわずかしかずれず，したがってもし R_0^2 が（$x_n^2+y_n^2$）の平均値の二倍に等しいとすると，殆んど正準交換関係に近い結果が得られるるというのがこの理論の主張である．

集団モードが分離できるためには，ある特定の物理量がその平均値から余りずれていてはならないという物理的仮定が必要であったのは別に驚くにあたらない．微視的な古典論から巨視的な理論への移行の際には同様な仮定がいつもなされるからである．

次にしなければならないことは，ハミルトニアンのうちの集団変数を含んだ部分を残りの部分から分離することである．Iを何かある質量に関係したパラメタとして，集団運動量は$\pi^2/2I$という形で現われる．これを運動エネルギーから引くと，残りはπを含まず，したがって集団座標ξと交換する

p. 81

はずである．(5.54)，(5.55) および (5.53) から

$$-(\hbar^2/2M)\sum_n\left[\frac{\partial^2}{\partial x_n^2}+\frac{\partial^2}{\partial y_n^2},\ \xi\right]=-(2\hbar^2/MNR_0^2)\sum_n\left(x_n\frac{\partial}{\partial x_n}-y_n\frac{\partial}{\partial y_n}\right),$$

$$[\pi^2,\xi]=-2i\hbar\pi=-2\sum_n \hbar^2\left(x_n\frac{\partial}{\partial x_n}-y_n\frac{\partial}{\partial y_n}\right) \tag{5.56}$$

が得られるから，質量に関係するパラメーターIは次の関係で与えられる．

$$I=\frac{1}{2}MNR. \tag{5.57}$$

座標ξも同様にしてハミルトニアンから分離される．$[\pi,\xi]=-i\hbar$は近似的にのみみたされているのであるから，ξはポテンシャル・エネルギーの中にも運動エネルギーの中にも現われる．ハミルトニアンはξのベキに展開でき，その展開の最初の数項は

$$H=(T_0+V_0)+\xi(T_1+V_1)+\xi^2(T_2+V_2)+\pi^2/2I+\cdots \tag{5.58}$$

となる．すべての係数は内部座標と内部運動量の関数である．集団変数を含まない項は内部運動を与え，集団変数について二次の項は集団振動を与え，一次の項はこれら両運動の間の結合を与えるが，理論が成立つためにはこの結合は小さくなければならない．

集団運動の方法は殆んどあらゆる種類の物理系に応用できる．たとえば (5.55) に現われる平均値は，系の性質と系に課せられた条件とによるが，集団変数を分離するのに使われた方法は全く一般的で系の種類によらない．集団変数は普通粒子置換に対して対称であり，したがって波動関数の反対称性による効果はすべて，内部変数に関係した波動関数の部分におしこめられ

る．内部変数は集団変数に直交しなければならないので，非常に複雑な形になり，第II章でも見たように，それの取扱いは大変むつかしい．このため，もともとの粒子の座標と運動量はそのままにしておいて，余分の集団変数を導入して，系の自由度より多くの変数を使って問題を考えていく，という方法の方がしばしば便利である．この余分の変数は，内部変数と集団変数とを関係づける補助条件によって後ほどとり除くのである．Elliott と Skyrme (1955) はこの方法を用いて，原子核の殻模型のために生ずる見かけの重心運動をどのように補正すればよいか議論している．

この方法のもう一つの困難は，ハミルトニアンの形から集団運動の性質を
p. 82 決定する手段がこの方法からは何ら与えられないということである．適当な集団変数を推量し，それからハミルトニアンが集団運動の部分と内部運動の部分とに分けられるかどうか見なければならない．この困難は原子核の回転運動を考えるときとくにはっきりしてくる．この場合，適当な集団運動量は角運動量であるが，質量パラメーター，すなわち今の場合慣性能率が選んだ集団座標によって変る．座標がうまく選ばれていると，ハミルトニアンはその座標に殆んど無関係になるはずである．なぜなら，回転体に対するハミルトニアンは，その回転体の方向には無関係な関数であるはずであるから，原子核に対する二つの両極端の仮定は，一つは核が渦なし流体のように回転すると仮定すること，もう一つは剛体球のごとく回転するとすることである．どちらの場合でも，慣性能率は容易に計算できるが，ハミルトニアンが実際にいずれかの場合のように分離するという証拠は全然ない． この問題は Bohr と Mottelson (1958) によって議論されている．測定された慣性能率の値は，上の二つの模型から得られるものの中間で，剛体球模型にやや近い値をとるようである．

8．生成座標 (Generator coordinates)

原子核（または他の多フェルミ粒子系）における集団運動を取扱うための生成座標の方法は，Hill と Wheeler (1953) によって提案された． この方

法は殻模型が原子核のよい記述になっているという事実に基礎をおいているので，Tomonaga の集団変数の方法ほど一般的ではない．**生成座標** (generator coordinate) と呼ばれるあるパラメタ α に依存する殻模型のポテンシャルを用いる．たとえば Peierls と Yoccoz (1957) によって調べられた回転運動の場合ならば，このパラメタは回転楕円体ポテンシャルの軸の方向を表わす．もしそのポテンシャルがつじつまあったポテンシャルであると，最も低い殻模型波動関数の行列式はハミルトニアンの期待値を極小にしなければならない．しかしこの期待値はポテンシャルの方向にはよらない．この理論の最も簡単な形では (Peierls と Yoccoz, 1957 および Griffin と Wheeler, 1957) 異なる α の値に対する殻模型波動関数 Φ_α の一次結合から成る新しい波動関数 Ψ を使ってハミルトニアンの期待値を計算する．新しい波動関数は

$$\Psi=\int f(\alpha)\,\Phi_\alpha d\alpha \tag{5.59}$$

と書ける ハミルトニアンの期待値が停留値をとるという条件から，$f(\alpha)$ に対する同次の一次方程式が得られる．この最低の固有値に対応する解は，基底状態に対する Φ_α よりはよい近似解を与え，他の解は集団励起状態に対
p. 83 する波動関数を与える．回転運動の場合，$f(\alpha)$ は球面調和関数でなければならず，ハミルトニアンの期待値を計算すれば回転準位のエネルギーが求まる，この計算は Yoccoz (1957) によってなされた．

この方法の欠点は次の事実にあらわれてきている．すなわちこの方法では，不変量の考察から期待される原子核エネルギーの正しい運動量依存性が出てこないのである．このことは Peierls と Yoccoz (1957) の論文中に示されている．この困難を取除く方法が Gross (1960 b) によって提案された．殻模型波動関数が集団運動量のある特定の平均値を与えるように選んだ集団座標の積の指数関数を殻模型波動関数にかけておくのである．そしてこれらの積の一次結合を試行波動関数として用いる．並進運動の場合には，基底状態は簡単な理論と同じように求まるが，運動量 P の状態のエネルギーは，まず殻模型ポテンシャルに速度 P/NM を与え，それから運動量 P をもった成分を選び出すことによって求められる．回転運動の問題では，この二つの

段階の最初のものだけを行う．すなわち角運動量を波動関数に与えるだけで，角運動量の固有関数を選び出すことはしない．Gross はこの方法が慣性能率に対する〝クランキング模型〟の式を与えることを示した．クランキング模型の式は最初 Inglis (1954, 1956) によって導かれたものである．彼は角速度 ω でゆっくり廻っている回転楕円体ポテンシャルの中を核子が運動していると仮定した．エネルギーの依存性から慣性能率が求まる．クランキング模型は〝対エネルギー効果〟に対する補正を入れると実験と非常によく合うことが知られている (Griffin と Rich, 1960).

『生成座標の方法のそれ以後の発展は，Peierls と Thouless (1962) の論文に含められている．この方法は，エネルギーの正しい運動量依存性を与えることが知られている．2個のパラメタに関係した殻模型形の波動関数を選ぶ．これらのパラメタは，並進運動の場合なら速度と位置でよく，回転運動ならば，角運動量と方向をきめる角に，あるいは振動に対しては古典的な作用と角度数でよい．試行関数としてこれらの二つのパラメタの種々の値に対応する波動関数の一次結合を採り，二つのパラメタに依存する重価関数は，ハミルトニアンの期待値を極小ならしめるように選ぶ．この方法は Gross (1960 b) の方法よりも複雑であるが，三次元空間で回転している軸対称核の場合にも応用できるのに反し，Gross の方法はこの問題にどのように適用してよいかわからない.』

9. 二粒子グリーン関数

この章のはじめの部分で，われわれは (5.1) で定義される一粒子グリーン関数について調べ，N粒子系の基底状態に一個の粒子をつけ加えるか，または基底状態から一個の粒子を取除くことによって得られる状態についての情報が，この一粒子グリーン関数により与えられることを知った．一粒子グリーン関数の知識を使って，一粒子演算子の期待値を計算することはできるが，二粒子演算子の期待値を計算することは，ポテンシャル・エネルギーの計算を行う場合以外は不可能である．一粒子グリーン関数は．$N+1$ 粒子系と N

−1 粒子系の励起状態についての情報を与えるが，N粒子系の励起状態につ
p. 84
いては何の情報も提供しない．このため二粒子グリーン関数についても知ることが大切になる．二粒子グリーン関数は次式で定義される．

$$G(k_1,t_1;\ k_2,t_2;\ k_3,t_3;k_4,t_4)=\langle\Psi_0|\,T[a^\dagger_{k_1}(t_1)a_{k_2}(t_2)a^\dagger_{k_3}(t_3)a_{k_4}(t_4)]\,|\Psi_0\rangle. \tag{5.60}$$

この定義は (5.1) の一般化である．この関数がみたすいくつかの明白な対称関係がある．二つの時間変数が一致する時，グリーン関数の値は不連続になり，その不連続値は一粒子グリーン関数に等しい．種々の分数公式も作ることができるが，その関数は一般形のままでは非常に複雑なので，それをそのまま取扱わず，いくつかの特別な場合についてのみ考えることにしよう．

(5.60) の右辺はハミルトニアンの固有状態間を結ぶ発生および消滅演算子の行列成分の積の和の形に展開できる．その和の中の各項に三種の中間状態があらわれる．第一と第三の中間状態は ($N\pm1$) 粒子系の状態であり，それが一粒子グリーン関数の性質をきめている．第二の中間状態は，もし t_1 と t_3 が両方とも t_2 と t_4 より小さければ，$N+2$粒子を含み，またもし t_2 と t_4 が両方とも t_1 と t_3 より小さければ，$N-2$粒子を含む，その他の場合には N個の粒子を含む．一粒子グリーン関数の知識から，第一および第三の中間状態については多少ともわかっているから，最も興味のあるのは第二の中間状態である．時間変数を二つづつ対にし，対の中の変数が等しいとおくことによって，二粒子グリーン関数の ($N\pm1$) 粒子状態への依存性を消すことができる．変数を対にする仕方が二つあるので，一変数の関数が二つでき，それらは

$$G(k_2,k_1;\ k_3,k_4;\ t_1-t_2)=G(k_1,t_2;\ k_2,t_2;\ k_3,t_1;\ k_4,t_1)$$
$$=\begin{cases}\langle\Psi_0|a^\dagger_{k_1}a_{k_2}\exp[i(H-E_0)(t_1-t_2)]\,a^\dagger_{k_3}a_{k_4}|\Psi_0\rangle, & t_1<t_2,\\ \langle\Psi_0|a^\dagger_{k_3}a_{k_4}\exp[-i(H-E_0)(t_1-t_2)a^\dagger_{k_1}a_{k_2}|\Psi_0\rangle, & t_1>t_2\end{cases} \tag{5.61}$$

と

$$\mathcal{G}(k_1,k_3;\ k_2,k_4;\ t_1-t_2)=G(k_1,t_2;\ k_2,t_1;\ k_3,t_2;\ k_4,\ t_1)$$
$$=\begin{cases}\langle\Psi_0|a^\dagger_{k_3}a^\dagger_{k_1}\exp[i(H-E_0)(t_1-t_2)]\,a_{k_3}a_{k_4}|\Psi_0\rangle, & t_1\leqq t_2,\\ \langle\Psi_0|a_{k_2}a_{k_4}\exp[-i(H-E_0)(t_1-t_2)]\,a^\dagger_{k_3}a^\dagger_{k_1}|\Psi_0\rangle, & t_1>t_2\end{cases} \tag{5.62}$$

である．これらの関数のうち第二のものは超伝導の理論で重要な役割をする．これについては第Ⅷ章8節で簡単に議論する．一方（5.61）で定義されるグ
p. 85
リーン関数は特に有用である．（5.61）は唯一個の時間変数だけに依存するので，（5.13）および（5.14）を使って進んだ部分でおくれた部分のフーリエ変換を求めることができる．（5.61）のおくれた部分のフーリエ変換は

$$G^{(r)}(k_2,k_1;k_3,k_4;z)=\sum_n\langle\Psi_0|a^\dagger_{k_1}a_{k_2}|\Psi_n\rangle(E_n-E_0-z)^{-1}\langle\Psi_n|a^\dagger_{k_3}a_{k_4}|\Psi_0\rangle \tag{5.63}$$

となる．外部摂動に対する系の応答を，二次の摂動論で計算する時に上のような式がでてくる．たとえば核物質に，振幅 B，波数 q，振動数 ω をもち，空間ならびに時間について週期的な静電場をかけると摂動ハミルトニアンは

$$\begin{aligned}\int e\rho^{(p)}(r)B\exp(i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}-i\omega t)\,d^3r&=eB\exp(-i\omega t)\sum_k a_k^{(p)\dagger}a_{k+q}^{(p)}\\&=eB\exp(-i\omega t)\rho_q^{(p)}\end{aligned} \tag{5.64}$$

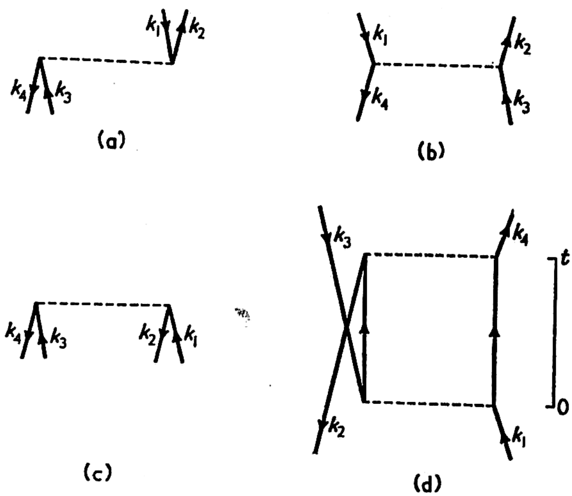
という形に書ける．ここで $\rho^{(p)}(r)$ は点 r における陽子の密度であり，$\rho_q^{(p)}$ はその密度の q 番目のフーリエ成分である．核物質による前方散乱の振幅は

$$\begin{aligned}&eB^2\sum_n\langle\Psi_0|\rho_{-q}^{(p)}|\Psi_n\rangle(E_n-E_0-\hbar\omega)^{-1}\cdot\langle\Psi_n|\rho_q^{(p)}|\Psi_0\rangle\\&=eB^2\sum_k^{(p)}\sum_{k'}^{(p)}G^{(r)}(k,k+q;k',k'+q:\hbar\omega)\end{aligned} \tag{5.65}$$

で与えられる．右辺の和は陽子の演算子についてのみ行う．これは二次の摂動論で与えられる式を（5.63）を使って書きなおしたものである．

われわれが一粒子グリーン関数を摂動論で計算したのと同じ方法を使って，Landau (1958) は二粒子グリーン関数を計算した．今度は二本の外線をもったすべてのつながったグラフを加えなければならない．原則として，一粒子グリーン関数はわかっているとするので，むすばれたグラフ（フェルミ粒子の自己エネルギー部分を含まないもの）のみを加え，フェルミ線からの寄与を表わす因子として無摂動系の伝播関数の代りに真の伝播関数 $S_k(t)$ を使えばよい．すると二粒子グリーン関数は，すべての既約なバーテックス部分 $\boldsymbol{\Gamma}(k_2, k_1;\ k_3,\ k_4;\ t)$ の和によって計算することができる．既約なバーテックスは時刻 t に k_3-線が入り，k_4-線が出るようなバーテックスと，時刻0で

k_3- 線が入り，k_4- 線が出るようなバーテックスを持ったグラフで与えられる．ここで既約なグラフとは，グラフ上の同じ時刻にある．二本のフェルミ線を
p. 86
切るだけでは二つの部分に分けられないようなグラフのことである．既約なバーテックス部分のいくつかの例を21図に示す．(5.24) を導いたのと同じ



21図　既約なバーテックス部分の例

やり方で次の方程式が得られる．

$$G(k_2, k_1; k_3, k_4; t) = S_{k_1}(0)S_{k_3}(0)\delta_{k_1k_2}\delta_{k_3k_4} - S_{k_1}(-t)S_{k_2}(t)\delta_{k_1k_4}\delta_{k_2k_3}$$
$$-\sum_{k_5}\sum_{k_6}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} S_{k_1}(-t')S_{k_2}(t')\Gamma(k_{k_2,k_1}; k_5,k_6; t''-t')$$
$$\times [G(k_5,k_6;k_3,k_4;t-t'') - S_{k_5}(0)S_{k_3}(0)\delta_{k_5k_6}\delta_{k_3k_4}]\,dt'dt''. \quad (5.66)$$

この方程式を使うために次の二つの仮定をしよう．第一の仮定は準粒子近似がよい近似であるとし，$S_k(t)$ は (5.32) や (5.33) で示したような指数関数でおきかえられるとする．そうすれば

$$G(k_2, k_1; k_3, k_4; z) = [\theta_{k_1}(1-\theta_{k_2}) - \theta_{k_2}(1-\theta_{k_1})]\,(\epsilon_{k_2} - \epsilon_{k_1} - z)^{-1}$$
$$\times [\delta_{k_1k_4}\delta_{k_2k_3} - \sum_{k_5}\sum_{k_6}\Gamma(k_2k_1; k_5,k_6; z)G(k_5,k_6; k_3,k_4; z)] \quad (5.67)$$

が導かれる．ここで準粒子の減衰は無視した．θ_k はフエルミ面の内部では

1，外部では0となる関数であり，ϵ_k は準粒子のエネルギーである．

運動量 k_1 と k_2 の差-これは k_3 と k_4 との差に等しいはずであるが-が小さい場合がとくに面白い．この極限では $\Gamma(k, k+q; k', k'+q)$ が q によらないと仮定して差支ない．ただし相互作用は長い到達距離をもたない，すな
p. 87 わち小さな運動重変化に対して特異的に振舞わないものとする．この註釈が必要なのは，21図(a)と(c)のグラフに示されている．Γへの一次の寄与が，クーロン相互依用の場合には q^{-2} に比例するからである．この仮定を入れると (5.67) は次の形に書き変えられる．

$$(\epsilon_k-\epsilon_{k+q}-z)G(k, k+q; k', k'+q; z)$$
$$=[\theta_{k+q}(1-\theta_k)-\theta_k(1-\theta_{k+q})]$$
$$\times[\delta_{kk'}-\sum_{k''}\Gamma(k,k;k'',k'';z)G(k'',k''+q;\ q;k',k'+q;z)]. \quad (5.68)$$

関数 $\Gamma(k,k;\ k'',\ k'';0)$ は，フェルミ流体の理論で (5.37) 式で導入された $f(k,\ k'')$ に等しいとおけることが Landau (1958) によって示された．(5.63) から明らかなように，ハミルトンアンの固有値はグリーン関数の極で与えられ，このグリーン関数の極は，方程式 (5.67) の斉次の部分が解をもつような z の値によって与えられる．(5.68) の斉次の部分は

$$(\epsilon_k-\epsilon_{k+q}-z_0)\ G(k,\ k+q;\ k',\ k'+q;\ z_0)$$
$$-[\theta_{k+q}(1-\theta_k)-\theta_k(1-\theta_{k+q})]$$
$$\times\sum_{k''}\Gamma(k,k;k'',k'';z_0)G(k'',k''+q;k',k'+q,z_0)=0 \quad (5.69)$$

と書ける．この方程式は (5.48) と同じものと見なすことができる．なぜなら Γ は f に等しく，$\epsilon_{k+q}-\epsilon_k$ は $\mathbf{q}\cdot\partial\epsilon/\partial\mathbf{k}$ に等しく，$[\theta_{k+q}(1-\theta_k)-\theta_k(1-\theta_{k+b})]$ はほぼ $\mathbf{q}\cdot\partial n_0/\partial\mathbf{k}$ に等しいからである．このことから，零音波の量子は相互作用によって結合した空孔と粒子がある位相関係をもって励起されたものであることがわかる．

簡単化のために導入する第二の仮定は，既約なバーテックス部分への一次の程度の寄与だけを考慮することである．一次の寄与は21図の (a), (b), (c) に与えられていて，そのグラフだけをとった近似では Γ が

$$\Gamma(k_2, k_1; k_3, k_4; z) = V_{k_2k_4, k_1k_3} - V_{k_4k_2, k_1k_3} \tag{5.70}$$

となる．q を k_1 と k_2 の差とし，ポテンシャルが局所的であると，その行列成分は運動量変化だけの関数になって，$V(q)-V(|k_1-k_4|)$ と書ける．これは短距離力に対しては q が 0 に近づくときある有限の極限値に近づく．したがって第二の仮定によりフェルミ流体理論であらわれた関数 f を粒子間の相互作用に関係づけることが可能になるわけである．f に対するこの近似は準粒子エネルギーに対するハートリー・フォック近似に相等し．これを(5.40)に代入すると，フェルミ面上での有効質量は同じ値が得られる．一方(5.69)に代入すると，系の励起状態のエネルギーに対して相互作用の強さに関して線形な方程式が得られる．この線形方程式は**乱雑な位相の近似** (random phase approximation, 以下 R.P. 近似と呼ぶ) として知られている近似を与える．

10. 時間に依存するハートリー・フオック理論

第Ⅷ章では，多少とも一般化しやすい R.P. 近似のいくつかの他の導き方を議論するが，この章では，一般化は容易でないけれど，系が集団運動をもつ場合に，系の中で何が起っているかについて力学的描像を簡単に描き出せるような R.P. 近似の導出についてのべる． この方法は，半古典的なので，答としてはエネルギーではなく振動数が求まる．これはハートリー・フオック近似にもとづいたものである．この方法は多くの著者達によって議論されたが，その中には，Zyrianov と Eleonskii (1956), Ferrell (1957), Goldstone と Gottfried (1959), Ehrenreich と Cohen (1959) らがいる．

『時間に依存するハートリー・フオックの方程式は Dirac (1930) によって得られたが，それは通常の時間によらないハートリー・フオック方程式の自然な拡張である．その方程式を導くには一粒子密度行列に対する運動方程式 (2.27) に，波動関数が常に単一の行列式で与えられるという条件，したがって二粒子密度行列は (2.24) 式で与えられるとすればよい．この結果としてとぢた非線型方程式

$$i\hbar\frac{\partial\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2M}(\nabla^2-\nabla'^2)\,\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')$$
$$+\int d^3\mathbf{r}_2\,[V(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2)-V(\mathbf{r}'-\mathbf{r}_2)]\,[\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_2)$$
$$-\rho(\mathbf{r},\mathbf{r}_2)\rho(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}')] \tag{5.71}$$

が得られる．これは自分自身のつじつま合った場の中で運動する粒子に対する密度行列の運動方程式である．行列の形式で書くと

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}=[T+U,\,\rho] \tag{5.72}$$

となる．ここで T は運動エネルギーの行列，U はつじつま合った場の行列で，その行列成分は

$$U_{pq}=\sum_{r,s}(V_{pr,\,qs}-V_{pr,\,sq})\rho_{sr} \tag{5.73}$$

で与えられる．これは (3.6) で定義されたつじつま合った場と同じであるが，密度行列が対角形に書かれていない点がちがう．これらの方程式を少しいじると，この近似では，ハミルトニアンと運動量および角運動量の成分の期待値が運動の恒数であることが証明される，

これらの方程式の時間によらない解は定常状態のハートリー・フォック方程式の解で与えられ，第III章1節で示したように，ハミルトニアンの期待値を極小にすることによって得られる．つじつまの合ったハミルトニアン (3.6) を対角化する表示を用いると，(5.72) の右辺の交換子は ρ が対角線的ならば0であることは明らかである．そこでこの表示を用い，基底波動関数としては定常状態のつじつま合った場の固有関数を用いて，方程式 (5.72) と (5.73) の定常解からわずかばかりずれた解を調べる．密度行列は勝手な風に変化させることはできないで，(2.21) からわかるように，波動関数が単一行列式であるならば $\rho^2=\rho$ の関係を満足しなければならず，またエルミットでなければならない．対角線的な定常解から，わずかずれた解を調べるために，平衡からのはずれについて線型な項だけを残す必要がある．(3.29) で与えられる行列式型の波動関数の表示を用いて，密度行列を最低次で組立てることができる．密度行列の対角成分に一次の変化はなく，また二つの占め

られた準位間あるいは二つの空いた準位間を結ぶ非対角成分もないことがわかる．（占められたあるいは空いたというのは，定常な方程式を満足するような配置についてである。）占められた準位と空いた準位の間を結ぶ非対角成分は

$$\begin{aligned}\rho_{mi} &= C_{mi}\\ \rho_{im} &= C^*_{mi}\end{aligned} \tag{5.74}$$

の形をもっている．この形の密度行列は，C_{mi} について一次の程度で $\rho^2=\rho$ を満足する．この形の ρ を (5.71) または (5.72) の中に代入すると

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{dC_{mi}(t)}{dt}=(\varepsilon_m-\varepsilon_i)C_{mi}(t)+\sum_{j=1}^{N}\sum_{n=N+1}^{\infty}[(V_{mj,in}-V_{mj,ni})C_{nj}(t)\\ +(V_{mn,ij}-V_{mn,ij})C^*_{nj}(t)]\end{aligned} \tag{5.75}$$

が得られる，ここで一次の項だけ残した．ε_i と ε_m は (3.7) で与えられるつじつま合ったエネルギー準位である．

この時間に依存するハートリー・フォック方程式を線型化したものは，平衡状態の解の周りの振動を表わす解を持っている．C_{nj} と C^*_{nj} は (5.75) 式の中で関係し合っているから，正の振動数と負の振動数の振動の間に結合がある．方程式は次の形の解をもっている．

$$C_{mi}(t)=\alpha X_{mi}e^{-i\omega t}+\alpha^* Y^*_{mi}e^{i\omega^* t} \tag{5.76}$$

ただし振幅 X_{mi} と Y_{mi} は次の方程式をみたす

$$\begin{aligned}&(\varepsilon_m-\varepsilon_i)X_{mi}+\sum_{j=1}^{N}\sum_{n=N+1}^{\infty}[V_{mj,in}-V_{mj,ni})X_{nj}+(V_{mn,ij}-V_{mn,ji})Y_{nj}]=\hbar\omega X_{mi},\\ &(\varepsilon_m-\varepsilon_i)Y_{mi}+\sum_{j=1}^{N}\sum_{n=N+1}^{\infty}[(V_{ij,mn}-V_{ij,mn})X_{nj}+(V_{in,mj}-V_{in,jm})Y_{ni}]\\ &\quad=-\hbar\omega Y_{mi}.\end{aligned} \tag{5.77}$$

これが乱雑位相近似(ＲＰＡ)の一般式であって，方程式 (5.69) と (5.70) は特別の場合になる．この方程式は (3.31) と比較されるべきもので，両者の主な相異点は右辺の符号のちがいである．方程式 (3.31) の固有値がすべて正ならば，これは実数の固有値だけをもつことが示され，したがって$|\Phi\rangle$ がハミルトニアンの期待値を本当に極小にするならば，方程式の解は平衡位

置のまわりの行列式の解の安定な振動を表わしている．しかし，もし$|\Phi\rangle$がハミルトニアンの期待値を極小にしないで，単に停留値をとる（例えば鞍部点のように）ならば，方程式（5.77）は負の虚数部分をもった固有値をもつことができ，方程式（5.76）は時間とともに自発的に成長して大きな振動をもつようになるモードを表わし，このときは時間に依存するハートリー・フオック方程式に対する線型近似は成立たなくなる．ハミルトニアンの期待値を極小ならしめないような定常的なハートリー・フオック方程式の解は，したがってそのような解の周りの集団運動は不安定になるという事実で特徴づけられる．

これまでの議論は，振動が任意の小さい振幅をもち得ると仮定しているいみで古典的であった．しかしこの理論は量子論でも充分根拠がある．というのは Goldstone と Gottfried (1959) が強調したように，系の基準振動が弱い外部からの摂動に対する応答をきめるからである．この近似では，加えられた弱い一粒子ポテンシャルに対する応答として，(5.63) 式からもわかるように，二粒子グリーン関数できまる表式を与える．この問題に対して別な見方をすると，基底状態からわずかばかりずれた状態での密度行列の時間変化は，基底状態と励起状態とを結ぶ密度演算子の行列成分できまり，したがって密度行列の基準振動数は，励起状態の励起エネルギーを $\hbar$ で割ったものに等しいことになる．

微小振幅の近似はたとえ運動が不安定でなくても，方程式（5.77）あるいは（3.31）が固有値0をもつと成立たなくなる．この場合ある種の集団運動に対して復元力がなくなるから，その振幅は時間に比例して大きくなる．この事情は古典的な微小振動の理論ではよく知られたもので，外力がはたらかない系では剛体運動をすることができる．例えば局在した波動関数を空間内で変位させるとき，あるいは球対称性をもたない波動関数を回転させるとき，復元力は存在しない．そのような場合には方程式（5.77）は振動数0の解をもっており，これらは第II章5節で議論したにせの状態に対応している．

方程式（5.75）の微小振幅近似はこのような場合に成立たなくなるから，

方程式 (5.71) あるいは (5.72) にもどる必要がある．局在した系の並進運動の場合は，一般的考察から充分よく理解されているから特に研究する興味はおこらないが，球対称でなく軸対称な核の可能な回転運動は大変興味がある．これを調べるために，定常的に回転している座標系へ変換するのがよい，この結果は方程式 (5.72) を

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}+[\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L},\rho]=[T+U,\rho] \tag{5.78}$$

に変えることになる． ここで $\boldsymbol{\omega}$ は回転の角速度，$\boldsymbol{L}$ は角運動量演算子である．方程式の定常的に回転している解を見出すには，(5.78) の回転座標系で定常的な解を探せばよい．方程式 (5.72) の定常解はハミルトニアン H の期待値を極小にする行列式を見つけることによって得られるから，方程式 (5.78) の一つの定常解は $H-\boldsymbol{\omega}\boldsymbol{L}$ の期待値を極小にすることによって見つけることができる．一般にこの解は回転軸の周りに対称的でないから，それは定常的に回転している系を表わしているにちがいない．

角速度 $\boldsymbol{\omega}$ が小さいと，定常な系における ρ の平衡値からのはずれは $\boldsymbol{\omega}$ のベキ級数として得られる． それは $\boldsymbol{\omega}$ の最低次で (5.74) 式で与えられる形をもたねばならない．これを (5.78) に代入すると

$$\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}_{mi}=(\epsilon_m-\epsilon_i)C_{mi}+\sum_{j=1}^{N}\sum_{n=N+1}^{\infty}[(V_{mj,in}-V_{mj,ni})C_{nj}+(V_{mn,ij}-V_{mn,ji})C^*_{nj}], \tag{5.79}$$

および，その共役式となる．これは斉次方程式 (5.75) に非常によく似た非斉次方程式である．エネルギーの期待値は角速度に二次式の形で依存し，角運動量の期待値は角速度に比例する．これら双方の期待値に対する比例係数が系の慣性能率を与え，それは

$$\mathcal{I}=\frac{1}{\omega}\sum_{i=1}^{N}\sum_{m=n+1}^{\infty}(L^x_{im}C_{mi}+C^*_{m}L^x_{mi}) \tag{5.80}$$

となる．ただし回転軸は系の対称軸に垂直で x 軸であるとした．ここで注意すべきことは，もし方程式 (5.79) の右辺の最初の項だけ考慮すると，方程式 (5.80) は

$$\mathcal{J}=2\sum_{i=1}^{N}\sum_{m=N+1}^{\infty}|L_{im}^{x}|^2/(\varepsilon_m-\varepsilon_i) \tag{5.81}$$

となり，これはクランキング模型 (Inglis, 1954, 1956) によって与えられる式と同じものである．この理論と回転の量子論との関係は，対応する振動の問題におけるほど，明らかではない．しかし，Peierls と Thouless (1962) の方法も慣性能率として同じ値を与える．

この節で述べた方法はもっと詳しく Thouless (1960, 1961) および Thouless と Valatin (1962) の論文中に議論されている．』

11. 殻模型への応用

前二節で展開した方法は，有限の系にも，無限の系にも応用できる．特別な例として，Ca^{40} のような充分な殻の外に核子をもたない球対称の核を考えよう．実際の核力はハートリ・フォック理論で取扱うのに不適当であることはわかっているが，Skyrme (1959) によって提案されたようなある有効ポテンシャルを使って計算できる．われわれに興味があるのは，閉じた殻から一つの核子を励起して得られる励起状態である．第一近似まででは，このような状態のエネルギーは核子が励起されていった殻のハートリー・フォックエネルギーと，粒子がもともといた殻のハートリー・フォックエネルギーの差で与えられる．9 節の方法を使って相互作用を考慮すると，グリーン関数の極は，(5.77) の固有値 $\hbar\omega$ でおこることがわかる．これらの極は基底状態エネルギーから測ったハミルトニアンの固有値を与える．(5.77) は一種の修正された Schrödinger 方程式で，その解は相互作用を考慮に入れた時に定常な粒子-空孔励起状態を与える．

『もし異なる粒子—空孔対の間の結合が弱ければ，方程式 (5.77) の一つの解は $\hbar\omega=\varepsilon_m-\varepsilon_i$ で与えられ，一つの X_{mi} は 1 他は 0 となる．これは極端な独立粒子像にあたり，励起状態のエネルギー準位は単に一粒子エネルギーの和で与えられる．励起状態はしばしば高度に縮退していて，相互作用の最低次の効果でもこの縮退を取除くから，上述の解は余りよい近似とは思えない．相互作用を最低次で考慮すると，正の振動数の振幅と負の振動数の振幅の間

の結合は二次の程度しかきかないから無視できて，方程式（5.77）は

$$(\varepsilon_m - \tau_i) X_{mi} + \sum_{j=1}^{N} \sum_{n=N+1}^{\infty} (V_{mj,\,in} - V_{mj,\,ni}) X_{nj} = \hbar\omega X_{mi} \qquad (5.82)$$

でおきかえられる．これは殻模型の基底状態から唯一個の粒子が励起されているような配置の間だけでハミルトニアンを対角化したときに得られる方程式である． この種の計算は Elliott と Flowers (1957) によってと O^{16} と N^{16} の奇の置換性をもった状態に対してなされた．最後に，もし励起状態のエネルギーの単純な殻模型の値からのずれが非常に大きいならば，正の振動数と負の振動数の間の結合が重要になると思われ， (5.77) の全方程式を用いなければならない． これによって生ずる補正は， 基底状態に粒子-空孔励起が存在するようになるのであるから，基底状態の零点運動にもとづく補正であるとみなすことができる．』

殻ポテンシャルは球対称であるから(5.77)の固有関数は角運動量と置換性 (parity) の固有関数でなければならない．電荷によらない力に対しては，これらは荷電スピンの固有関数でもある．閉ぢた殻をもつ軽い原子核の基底状態は，荷電スピンが0であるので（波動関数は陽子と中性子とに関して対称的）粒子-空孔励起状態の荷電スピンは0か1でなければ,ならない． 陽子と中性子が同位相で励起されると，荷電スピンは0であり，反対の位相で励起されると1である．この荷電スピン0をもつ準位は無摂動系の殻模型準位より下にあり，荷電スピン1をもつ準位は上にあることが，Brown 達 (1961) により示された．

角運動量が1で，奇の置換性をもち，荷電スピンが1であるような準位は，Brown と Balsterli (1959) により研究された．彼らが示したことは結合によりこれらの準位のうちの一つが他から遙かに高くなり，この高くなった準位だけが電気双極子演算子の大きな行列成分によって基底状態と結びつけら
p. 91
れているということである．この理論は Goldhaber と Teller (1948) による巨大双極子共鳴の集団的記述と， Wilkinson (1956) による殻模型にもとづいた記述との間の関係を教えている．Wilkinson によるとこの共鳴がおこ

るのは，関数をもった原子核の中の一つの粒子は，電気双極子型フォトンによりいろいろ異ったしかたで励起されるけれども，それらの励起はいずれも近似的に等しいエネルギーをもっているという事実のためである．Brown と Bolsterli の方法により示されることは，これらすべての可能な励起は，ある特定の組み合わせがおこった時だけ光子を吸収するようなしかたで結合していることであり，これが殻模型から予想されるよりも高いエネルギーで共鳴がおこる理由を説明する．『Brown と Bolsterli (1959) は，(5.77) ではなしに (5.82) を用いた．したがって21図の (a) と (b) は考慮したが21図 (c) は考えなかった．現在では (5.77) 式にもとづいた詳細な計算が O^{16} と Ca^{40} に対して Gillet (1962) によってなされている．その結果の一部は Gillet と Vinh Man (1962) の論文に発表されている．』

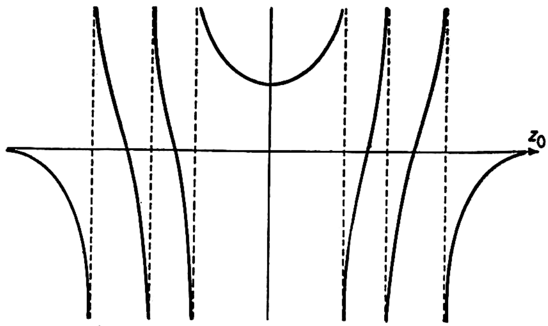
荷電スピン 0 の準位は，結合によりおし下げられ，その一つの準位は同じ量子数をもつ他のすべての準位よりずっと低くなりそうに思われる．角運動量 1 で奇の置換性をもった準位は原子核の並進運動に対応する見かけの準位である，この準位のエネルギーは (5.76) で与えられ 0 になる．角運動量 2 をもち置換性が偶であるような準位，および角運動量が 3 で奇の置換性をもつ準位は，それぞれ核の四重極および八重極振動であり，これらは実際低エネルギーで観測される．(5.77) の行列成分を一定値 V に等しくとって，これらの低い準位がどのように現われるかを調べることができる．(5.77) は

$$
\begin{aligned}
(\epsilon_m-\epsilon_i-z_0)X_{mi}&=-V\sum_{j=1}^{N}\sum_{n=N+1}^{\infty}(X_{nj}+Y_{nj})\\
(\epsilon_m-\epsilon_i+z_0)Y_{mi}&=-V\sum_{j=1}^{N}\sum_{n=N+1}^{\infty}(X_{nj}+Y_{nj})
\end{aligned}
\tag{5.82}
$$

となるから，固有値 z_0 は

$$
\sum_{i=1}^{N}\sum_{m=N+1}^{\infty}2(\epsilon_m-\epsilon_i)/[(\epsilon_m-\epsilon_i)^2-z_0^2]=-\frac{1}{V}
\tag{5.83}
$$

で与えられる．この方程式の左辺を，z_0 の関数として画くと，22図に示したような曲線が得られる．z_0 が殻模型エネルギーまたはその負の値に等しくなると，この関数は無限大になる．方程式の根は高さ $-\frac{1}{V}$ の水平線とこの曲



22図 方程式 (5.83) の左辺を z_0 の関数として画いた曲線. 高さ $-1/V$ の水平線と曲線の交点の横座標は, RP 近似で求めた励起状態のエネルギーに＋または－をつけたもをの与える.

線の交点によって与えられる. V が正であると, 根の一つはすべての殻模型準位よりも上にあり, V が相当小さくて負であると, この一根がすべての殻模型準位より下になる. もし殻模型準位がすべて接近して存在すると, この一根は, 他の殻模型準位に接近して存在する根からある距離はなれて現われることもありうる. V が負で大きくて, $z_0=0$ に対する方程式 (5.83) の左辺が $1/V$ より大きい位であると, 二個の虚根が現われ, 励起は不安定になる.

原子核における粒子―空孔励起状態の分析は, Sachs と Austern (1951) により議論された総和則を使うと簡単になる. この総和則は次の形をもっている.

$$\sum_n |\langle\Psi_0|Q|\Psi_n\rangle|^2(E_n-E_0)=\frac{1}{2}\langle\Psi_0|[Q,[H,Q]]|\Psi_0\rangle. \tag{5.84}$$

ここで Q は一粒子エルミート演算子である. Q は一粒子のみに作用するから, 左辺の和の中に現われる状態は, 粒子-空孔励起状態である. 右辺の期待値の中に現われる二重交換子は, かなり簡単な演算子か単なる数値になり, したがって右辺はしばしば左辺よりも容易に求められる. z_0を重心の z 成分として Q を

$$Q=e\int\rho^{(p)}(r)(z-z_0)d^3r \tag{5.85}$$

で与えられる電気双極子演算子であるとすると，Q と運動エネルギー演算子との二重交換子は

$$[Q, [T, Q]] = -(e^2\hbar^2/2MA^2)$$

$$\times\left[\left(\sum_{i=1}^{Z} Nz_i - \sum_{i=Z+1}^{A} Zz_i\right), \left[\sum_{i=1}^{A} \frac{\partial^2}{\partial z_i^2}, \left(\sum_{i=1}^{Z} Nz_i - \sum_{i=Z+1}^{A} Zz_i\right)\right]\right] = NZe^2\hbar^2/MA \quad (5.86)$$

となる．ここで e は陽子の電荷，M は核子の質量，Z は陽子の数，N は中性子の数，A は質量数である．もしもポテンシャルが局所的で電荷交換の部分をもたないと，それは Q と可換になり，(5.84) の右辺は $Nze^2\hbar^2/2MA$ となる．ガンマ線吸収を使って測定された左辺の値は，右辺に対する上述の値より大きいという実験事実から，Levinger と Bethe (1950) は，核子–核子ポテンシャルの中の電荷交換（これは Q と可換でない）の量を見つもった．RP 近似の一つの利点は，(5.84) の左辺の大きさを見つもるのに使うと，殻模型を使って見つもった結果よりも一般によい結果を与えることである．実際 RP 近似から得られる左辺の値は，$|\Psi_0\rangle$ をハートリー・フォックの基底状態の波動関数でおきかえたとき左辺がとるはずの値と同じである．これはグリーン関数の性質を基礎にして行った計算の方が，それを無視して行った計算よりも総和則や分散公式を成り立たせている可能性が多いという原理の一例である．

p. 93

"The Many-Body Problem" の中の Mottelson, Lipkin および Bohm の論文はこの章で述べた問題のいくつかをもっと詳細に取り扱っている．

第VI章 統計力学と超伝導理論

1. 分配関数

p. 95

前章では，多粒子系の基底状態エネルギーよりわずかばかり高いエネルギをもつ励起状態について考えた．たとえば，ある特定の運動量をもつ零音波量子のエネルギーは，フエルミ流体の体積が増しても増加しないで，一定のままである．われわれが考えた他のすべての型の励起も，系の体積が増したとき，励起エネルギーは一定のままか，減少するかのどちらかであった，系のひろがりに比例するような励起エネルギーを考える際には，起こり得る励起を非常に多数考慮しなければならず，その数は系のひろがりとともに指数関数的に増加する．そのような励起を正確に記述しょうとするのは明らかに無用であり，統計力学の方法が使われねばならない．それでわれわれは，励起状態の平均的な性質を，統計力学によって計算してみようというわけである．

量子力学系を調べるのに，一般に**大きいカノニカル集団**（Grand canonical ensemble）を用いるのが便利である．この集団に対しては，系のエネルギーと，粒子の数とは，あるきまった値をもつことは要求されていなくて，ただ，ある特定の平均値だけが指定されている．系の熱力学的性質は，すべて，大きい分配関数の振舞いから導かれる．この大きい分配関数は

$$\mathcal{Z}=\sum_{n}\exp(\alpha N_n-\beta E_n) \tag{6.1}$$

で与えられる．ここで，N_n は定常状態 n にある粒子数，E_n はその状態のエネルギーで，和は系のすべての定常状態についてとられる．系は体積 $\mathcal{V}$ にとじこめられていると仮定する．ある状態 n の相対的確率は，$\exp(\alpha N_n-\beta E_n)$ で与えられるから，系の平均エネルギーは

$$\bar{E}=\sum_n E_n \exp(\alpha N_N-\beta E_n)/\sum_n \exp(\alpha N_n-\beta E_n)$$
$$=-[\partial(\log \mathcal{Z})/\partial\beta]_\alpha, \tag{6.2}$$

となり，粒子の平均数は

$$\bar{N}=[\partial(\log \mathcal{Z})/\partial\alpha]_\beta \tag{6.3}$$

となる．パラメタ β は，κ を Boltzmann 定数，T を温度とした時，$(\kappa T)^{-1}$ である．また，μ を化学ポテンシャルとすると，α は $\beta\mu$ に等しい．他の熱力学関数も簡単に計算できる†．大きい分配関数から，最も直接に計算される量は，次式で与えられる圧力である．

$$p\mathcal{V}=\kappa T\log \mathcal{Z}=TS+\mu\bar{N}-\bar{E}. \tag{6.4}$$

$-p\mathcal{V}$ を**熱力学ポテンシャル**と呼ぶ．これが通常われわれが計算しょうとする量である．上の式で，エントロピーは S で表わされている．大きい分配関数は，**分布関数** (distribution function) とよばれる演算子

$$\psi=\exp(\alpha N-\beta H) \tag{6.5}$$

の対角成分の和である．関係式

$$\mathcal{Z}=\sum_n\langle\Phi_n|\psi|\Phi_n\rangle=\mathrm{T_r}\psi \tag{6.6}$$

は用いる表示に無関係に成り立つので，量子統計力学の展開に非常に有用になる．粒子演算子 N は，ハミルトニアン H と可換であるから，分布関数は次の方程式をみたす．

$$\partial\psi/\partial\beta=-H\psi. \tag{6.7}$$

この方程式は Bloch の方程式として知られており，波動関数に対する Schrödinger の方程式と非常によく似ていて，β を $it/\hbar$ でおきかえれば，Schrödinger の方程式になる．波動関数と，分布関数のこの形式的な類似は，いろんな形で利用されている．この章でみられるように，多粒子系の基底状

† 詳しいことは，L. Landau と E. Lifshitz の "Statistical Physics" (Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1958) の68—71頁，および105—107頁参照のこと．

態を調べるのに応用できる方法の殆んどすべてが，有限温度における諸性質をきめるのにも使える．とくに新しい方法を導入しなくても，前4章で展開
p. 97
された方法が有限温度の問題に応用できる．これまでの章では，種々の方法を核物理および液体 He^3 に応用してきたが，これからあとの章では，有限温度の金属の中またはプラズマの中の電子の性質を調べる．われわれの観点からみれば，この分野で最も興味のある現象は，極低温で多くの金属にあらわれる超伝導現象である．この現象を説明するために発展させられてきた手段は，核物理にも使える．また，このやり方を使って液体 He^3 も充分低温では，超流体になるかもしれないと予想される．この二つの応用をこの章で考えることにする．

2．自由なフェルミ粒子とボーズ粒子

相互作用のないフエルミ粒子，または，ボーズ粒子の系の分配関数は，簡単につくれる．準位 i にあって，エネルギー ϵ_i をもつ粒子の発生，ならびに，消滅演算子を，$a^\dagger_i$, a_i とすると，分布関数は，

$$\begin{aligned}\psi&=\exp\Big[\sum_i(\alpha a^\dagger_i a_i-\beta\epsilon_i a^\dagger_i a_i)\Big]\\&=\Pi\exp[(\alpha-\beta\epsilon_i)a^\dagger_i a_i]\end{aligned}\qquad(6.8)$$

となる．多くフエルミ粒子系のどんな配置においても，ある準位 i は，占められているか，占められていないかのどちらかであり，ψ の跡はそのすべての可能な組み合わせを加えて求められる．それゆえ，(6.6) により

$$\mathcal{Z}=\prod_i[1+\exp(\alpha-\beta\epsilon_i)]\qquad(6.9\text{a})$$

と書ける．ボーズ粒子系に対しても，準位 i は，0個，1個，2個，……以下任意の個数の粒子で占められるから，分配関数は，

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}&=\prod_i\{1+\exp(\alpha-\beta\epsilon_i)+\exp[2(\alpha-\beta\epsilon_i)]+\cdots\}\\&=\prod_i[1-\exp(\alpha-\beta\epsilon_i)]^{-1}\end{aligned}\qquad(6.9\text{b})$$

となる．これらの表式を (6.4)，(6.3)，(6.2) に入れると，次の式を得る．

$$p\mathcal{V}=\pm\kappa T\sum_i \log[1\pm\exp(\alpha-\beta\epsilon_i)],$$

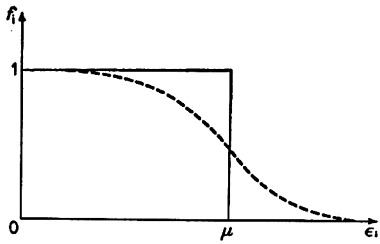
$$\overline{N}=\sum_i[\exp(\beta\epsilon_i-\alpha)\pm1],^{-1}$$

$$\overline{E}=\sum_i\epsilon_i[\exp(\beta\epsilon_i-\alpha)\pm1]^{-1}. \tag{6.10}$$

ここで，複号の上と下は，それぞれ，フェルミ粒子，および，ボーズ粒子に対するものである．

p. 98

これらは，もっと直接的な方法でも得られ，どの教科書でも議論されているおなじみの結果である†．非常に低い温度では，フェルミ粒子系における一つの準位の占められる確率は，ϵ_i が $\mu=\alpha/\beta$ より小さい時 1，ϵ_i が μ より大きい時は 0 になる．温度が上るにつれて，分布はなだらかになる．絶対零度，および有限温度に対する占有確率 f_i を ϵ_i の関数として23図に示してある．有限の温度では，μ は最低準位のエネルギーより大きいこともあり，小さいこともある．



23図　フエルミ気体のエネルギー準位の占有数 f_i をエネルギー ϵ_i の関数として画いたもの．実線は絶対零度における関数を，破線は有限温度における関数を与える．

ボーズ粒子に対しては，事情は全くちがってくる．すなわ，占有確率

$$f_i=[\exp(\beta\epsilon_i-\alpha)-1]^{-1}$$

はすべての i に対して正でなければならないから，μ は最低エネルギー準位よりも大きくはなり得ない．粒子数が保存しないフォノンとか光子とかの場合には，μ は 0 に等しい．しかし，粒子数が保存される自由ボーズ粒子を考えると，単位体積中の粒子数は，

$$\frac{\overline{N}}{\mathcal{V}}=\frac{1}{2\pi^2}\int_0^\infty\frac{k^2dk}{\exp(\beta k^2/2M-\alpha)-1} \tag{6.11}$$

---

† 例えば，L. Landau と E. Lifshitz の "Statistical Physics"(Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1958) の 152—179頁参照のこと

で与えられ，これは被積分関数が，つねに $2M/\beta$ より小さいので，α が下から 0 に近づいても有限の極限値に近づいて，発散しない積分になっている．$\alpha=0$ の極限で，積分は $(2M/\beta)^{3/2}$ の定数倍になり，α が 0 より小さいと，積分はこの値より小さい．一見すると，ある特定の温度において，密度はこの極限値をこすことはできないように思える．しかし，これは誤りで，α が 0 に近づくとき，最低準位の占有数はいくらでも大きくなり，この準位に粒子を何個でも収容できるようになる．(6.10) の和を，(6.11) の形の積分でおきかえることが，許されなくなるのである．もし，密度が (9.11) で与えられる最大値よりも大きいと，全粒子のうちのある有限の部分は，零の運動量をもち，最低エネルギー準位に落ちこまなければならない．

この零運動量状態へ粒子が凝縮するボーズ・アインシュタイン凝縮は，
p. 99
Einstein によって提案された (1924, 1925)．He^4 原子の質量をもち，液体ヘリウムの密度をもつ相互作用のないボーズ粒子が，ボーズ・アインシュタイン凝縮をおこす温度が 3.2°K であることから，2.2°K でおこる液体ヘリウムの超流動状態への転移を，この考え方で説明できるだろうと思われた．この問題は，London によって注意深く調べられた (1938)．実際，相互作用のないボーズ粒子系にも相転移はあるが，その時転移点において，比熱が不連続な勾配をもつのに反し，実際に観測されている液体ヘリウムの比熱は，転移温度の近くで急激に増加し，転移温度において明らかに対数的な特異性をもっている (Fairbank と協力者，1958)．また，相互作用のない粒子の系では，超流動はおこらない．第X章で，相互作用がこの事情をどのように変えるかを議論する．金属の超伝導は，いくつかの点で超流動に似ているけれど，上に述べたことと似たようなことは，自由なフェルミ粒子系では全然起こらない．この章で，少し詳しく議論する超伝導の理論は，超流動と超伝導が，物理的描像では全くちがっているけれども，両者の間に形式的な関係が存在していることを，示している．

後で必要になるので，(6.10) を少し書きなおして，粒子が光子やフォノンのような粒子数を保存しないボーズ粒子である場合に役立つ公式を導いて

おこう．まず，粒子数が保存しないので，α は零とおかねばならない．次に，零点エネルギーが存在する．このエネルギーは．光子に対しては至る所で無限大なので，通常無視されるが，フォノン系に対しては物理的な効果をもつので，これを含めておかねばならない．以上の二つの修正を加え，(6.9b) を適当に書き変えると，(6.10) は次の形になる．

$$p\mathcal{V}=-\kappa T\sum_i \log\left[2\ \sinh\left(\frac{1}{2}\beta\epsilon_i\right)\right],$$

$$\overline{N}=\sum_i\,[\exp(\beta\epsilon_i)-1]^{-1},$$

$$\overline{E}=\sum_i\frac{1}{2}\epsilon_i\coth\left(\frac{1}{2}\beta\epsilon_i\right). \qquad (6.11a)$$

3．超 伝 導

超伝導金属中の電子の性質は，相互作用のないフェルミ粒子の性質とは非常にちがっており，それらの性質がどのように説明されるか，長い間わからなかった．この問題に対する批判的な議論が，Feynmann (1957) によってなされた．彼は，説明すべき最も簡単な性質は，低温における比熱であろうと提案したが，これは実際正しかった．相互作用のないフエルミ粒子の気体の比熱は温度に比例し，超伝導体でない金属の比熱も十分低温で，実際温度に比
p. 100 例することが観測されている．ところが，超伝導体内の電子の比熱は温度に比例しないで，温度の逆数のマイナスの指数関数の形に変化するように見える．これは，金属の全比熱から温度の三乗に比例するフォノンの比熱を差引いて測定できる．比熱が指数関数的な振舞いをするということは．次のことを暗示している．すなわち，**エネルギー・ギャップ**が存在し，超伝導体中の最低励起状態は，系のひろがりに無関係な有限のある量だけ，基底状態からはなれている．相互作用のないフェルミ気体ならば，最低励起状態は，基底状態にいくらでも接近して存在しうる．なぜなら，フェルミ運動量より少しだけ小さい運動量をもったフェルミ粒子を，殆んどエネルギーを費やさずにフェルミ面のすぐ上に励起できるからである．マイクロ波の吸収，その他種々の測定によって，このエネルギー・ギャップの存在が確かめられている

(Biondi 達, 1958).

超伝導の性質を探るもう一つの，非常に大事な鍵は，Maxwell (1950) や，Reynolds 一派 (1950) によって実験的に発見され，理論的根拠から，Fröhlich (1950) によって独立に予言されたところの，**同位元素効果**である．超伝導がおこる臨界温度を，同じ金属の異る同位元素に対して測定すると，臨界温度が同位元素の質量数に比例することが見出される．このことは，結晶格子が超伝導の機構に重要な役割を果していることを示し，フォノンの交換によって生ずる電子間の引力が，超伝導の原因であるという Fröhlich の推測を確証することになる．このアイディアについては，後にもっと詳しく議論する．超伝導の他の性質は，エネルギー・ギャップの生ずる理由がわかりさえすれば，直ちに説明できると考えられる．最も著しい性質は，超伝導体の非常に高い電気伝導度で，たとえば，超伝導状態にある金属の環の中を，電流は何日も流れつづける．これと密接に関係しているのが，マイスナー効果である．すなわち，超伝導になる金属の中に，転移温度以上で初め磁場が侵入していても，金属を冷やして超伝導状態にすると，この磁場は金属から完全に追い出されてしまう．充分高い磁場をかけると，超伝導状態はこわれて，金属は"正常状態"にもどる．磁場がないと，比熱は臨界温度で不連続であるが，潜熱はなく，比熱の値は有限にとどまる．超伝導体についての総合報告は，"Handbuch der physik" の中の Serin (1956) と Bardeen (1956) の解説にみられる．

『基本的に重要な最近の発見は超伝導体の輪の中にとぢこめられた磁束が量子化されるということである．この効果は超伝導の微視的理論にもとづいて，London (1950) が予想していたことであった．London は波動関数が一粒子系の波動関数のようにかたくて，相互作用のないフエルミ粒子系の波動関数が摂動に対して変形するようには変形できないと想像した．磁場は超伝導体の中に侵入しないから，超伝導体内のベクトル・ポテンシャルはあるスカラー場の勾配として表わされる．

$$\mathbf{A}(\mathbf{r})=\mathrm{grad}\ u(\mathbf{r}) \tag{6.11b}$$

超伝導リングは一重連結でないから，u は一般に座標の一価関数でなくて，リングに沿って一周したときの変化は

$$\Delta u=\oint \mathbf{A}(\mathbf{r})\cdot d\mathbf{r}=\iint \mathbf{B}\cdot d\mathbf{s} \tag{6.11c}$$

となり，これはリングを貫く磁束に等しい．(6.11b) で定義されるような渦なしの ベクトル・ポテンシァルを つけ加えた ために 生ずるゲージの変換に対して，波動関数はベクトル・ポテンシャルが存在するときの Schrödinger 方程式をみたすために因子

$$\exp\left[\frac{ie}{\hbar c}\sum_{j=1}^{N}u(\mathbf{r}_j)\right]$$

をかけなければならない．もし波動関数が一価関数のままであることを要求すれば，Δu は $2\pi\hbar c/e$ の倍数でなければならない．従って (6.11c) 式によれば，磁束は

$$\frac{\hbar c}{e}\simeq 4\times 10^{-7}\ \text{gauss cm}^2$$

を単位として量子化されるはずである．

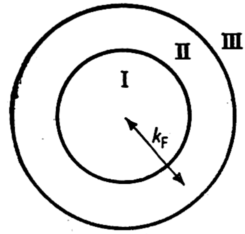
Deaver と Fair banck (1961) および Doll と Näbauer (1961) による実験結果は，量子化された磁束の単位が，実際はこの値の半分であることを示し，超伝導電流の運び手は電子の電荷の 2 倍をもったものであることを暗示している．この結果は超伝導が結合した電子対のボーズ・アインシュタイン凝縮によるのかも知れないという，Schafroth (1954) の提案の実験的検証を与えている．』

4. 超伝導状態の模型

p. 101

Bardeen 達 (1957) によって 提案された 超伝導理論 について 述べる前に，Wada 達 (1958) および Anderson (1958) によって考えられた，超伝導体の一つの模型を考えよう．これは非常に非現実的な模型であるが，厳密に解け，しかもその解は超伝導体の簡単な性質を大抵説明するという長所を

もっている．



24図　起伝導の模型に使われた運動量空間の三つの領域

運動量空間を，24図のように同心の二つの球で，三つの領域に分ける．領域IとIIIでは，粒子間の相互作用はないとし，準位 i のエネルギーは，ϵ_i であるとする．領域IIでは，すべての準位が同じ運動量エネルギー T をもち，反対向きのスピンと運動量をもつ粒子同志は，一定の強さの相互作用で散乱し合うと考える．この領域に対するハミルトニアンは，

$$H_{II}=\sum_i T(a^\dagger{}_{i+}a_{i+}+a^{+}_{-i-}a_{-i-})+J\sum_i\sum_j a^\dagger{}_{i+}a^{+}_{-i-}a_{-j-}a_{j+}$$
$$=T\sum_i (a^\dagger{}_{i+}a_{i+}+a^{+}_{-i-}a_{-i-})+J(\sum_i a^\dagger{}_{i+}a^{+}_{-i-})(\sum_i a_{-i-}a_{i+}) \qquad (6.12)$$

で与えられる．ここで，a_{i+} は，運動量 i と，ある特定の方向，たとえば上向きのスピンをもつ粒子の消滅演算子，また，a_{-i-} は，運動量 $-i$ と，下向きスピンをもつ粒子の消滅演算子である．和は領域IIの運動量のすべての値について加える．領域IとIIIでは，粒子間の相互作用がないから，余り積極的な役割は果さず，これらの領域は問題にしなくてよい．フエルミ準位は領域IIにあるものとする．したがって領域Iの準位は，殆んどすべて占められており，領域IIIの準位は，殆んどすべてあいている．

これは，超伝導状態にある金属内の電子に対しては，非常に非現実的な模型であるが，この模型がもっと意味をもつような，物理的系も存在する．一つの原子核があって，その領域Iが，占められた殻すべてを含み，領域IIIは空の殻をすべて含み，領域IIが部分的にみたされた殻になっていると，これ

p. 102

はもっともな模型になる．配位混合（configuration mixing）を無視しても，よい近似になっているときには，領域IもIIIも，重要な役割はしない．領域IIにあるすべての核子は，同じ殻にあるから，すべて等しいエネルギーをもっている．核子間の相互作用が，短距離力であると，ちょうど反対向きの角運動量をもつ粒子を散乱するポテンシャルの行列要素が，他の行列要素より

遙かに大きくなる．この形を使って Racah (1949) はこの問題を解いたが，それは超伝導理論への応用が考られる，ずっと以前のことである．

準位の対（すなわち，反対のスピンと反対の運動量をもった準位）が，ある時刻に一粒子のみで占められていると，それはいつまでたっても，一粒子で占められたままであることがわかる．それは，この粒子を散乱できる相手の粒子がないこと，および，ある粒子の対が，この準位に散乱されて入って来ることは，排他律によって禁止されているからである．そのような対になる相手のない粒子は，領域ⅠとⅢの粒子と同様に，無能であって，(6.12) 式の和において，そのような半分みたされた準位の対は，すべてはぶくことができる．

一対の準位にある2個の粒子を，同時に消す演算子を，

$$\beta_i = a_{-i-}a_{i+} \tag{6.13}$$

と書く．この演算子は，次の関係をみたす．

$$\begin{aligned}
&[\beta_i, \beta_j] = 0,\\
&\beta_i^2 = \beta_i^{+2} = 0,\\
&[\beta_i, \beta_j^+] = 0, \qquad (i \neq j \text{ のとき}),\\
&\beta_i\beta_i^+ + \beta_i^+\beta_i = (1-n_{i+})(1-n_{-i-}) + n_{i+}n_{-i-} = 1,
\end{aligned} \tag{6.14}$$

この最後の関係式は，対になった準位の両方が，同時にみたされているか，両方とも空である時だけ成り立ち，対になった準位の一方だけがみたされている時には正しくない．もし

$$\begin{aligned}
1 - n_{i+} - n_{-i-} &= 2s_{zi},\\
\beta_i &= s_{xi} + is_{yi},\\
\beta_i^+ &= s_{xi} - is_{yi}
\end{aligned} \tag{6.15}$$

のように書くと，上式の関係は，そっくりそのまま角運動量 $\frac{1}{2}\hbar$ をもった異なる粒子のスピン演算子がみたす関係式に等しくなる．スピン演算子を使うと，次の式を得る．

$$\beta_i^+\beta_i = (s_{xi} - is_{yi})(s_{xi} + is_{yi}) = \frac{1}{2} - s_{zi} \tag{6.16}$$

したがって，領域II′(領域IIから，半分だけみたされた準位の対を除外した領域）のハミルトニアンは，

$$
\begin{aligned}
H_{\mathrm{II}}' &= T\sum_i (1-2s_{zi}) + J\left[\sum_i (s_{xi}-is_{yi})\right]\left[\sum_i (s_{xi}+is_{yi})\right] \\
&= T(B-2S_z) + J(S_x-iS_y)(S_x+iS_y) \\
&= T(B-2S_z) + J[(S_x^2+S_y^2+S_z^2)-(S_z^2+S_z)]
\end{aligned}
\tag{6.17}
$$

となる．ここで B は，領域IIの準位の対の数である．また，これらの〝スピン″演算子の和が，成分 S_x, S_y, S_z をもつ合成スピン角運動量を与えるという事実を用いた．同様にして，領域II′に対する粒子数演算子として

$$
N_{\mathrm{II}}' = 2\sum \beta_i^\dagger \beta_i = B-2S_z \tag{6.18}
$$

を得る．

かくて，われわれは，対を作ろうとする力で相互作用している粒子系の元の問題を，それと同等な別の問題にすりかえ，その結果大きさ$\frac{1}{2}$のスピンをもった，固定された粒子群を，ハミルトニアン (6.17) に合成スピンのみが含まれるような形に結合するという問題を考えればよいことになったわけである．(6.15) からわかるように，新しい問題で，粒子の一つのスピンが上向きであれば，元の問題の対応する準位の対が空いていることにあたり，スピンが下向きならば，対応する準位の対は，占められていることになる．もし，S_z と，$(S_x^2+S_y^2+S_z^2)$ を両方対角化すれば，粒子数演算子 (6.18) も，ハミルトニアン (6.17) もともに対角化される．この第二の演算子は，合成スピンの二乗であるから，S_z と可換であり，両者は同時に対角化できる．合成スピンの z- 成分は，B が偶数であるか，奇数であるかに応じて，整数，又は半整数でなければならない．又，$(S_x^2+S_y^2+S_z^2)$ は，$S(S+1)$ に等しく，S は $|S_z|$ よりも大きく，$\frac{1}{2}B$ よりも小さい整数，または，半整数で与えられる．元の問題での領域II′にある粒子の総数から S_z が決まり，したがって S によりエネルギーがきまる．

もし，スピンがすべて z-軸に平行か，または，反平行であると，S_z は

$\pm\frac{1}{2}B$ となり，S は $\frac{1}{2}B$ に等しくなければならない． $S_z=\pm(\frac{1}{2}B-1)$ を作る仕方は，B 通りあるが，その仕方の一つは，合成スピン $\frac{1}{2}B$ をもっている．したがって，残り $B-1$ は，合成スピン $\frac{1}{2}B-1$ を持たなければならない．この論法は，同様にして一般の場合に進められる．一般に，$S_z=\pm(\frac{1}{2}B-r)$ を作る仕方の数は

$$B!/r!(B-r)!$$

通りあるから， $S\geq(\frac{1}{2}B-r)$ とする仕方の数も，同数だけある．したがって， $S=\frac{1}{2}(B-r)$ とする仕方の数は，

$$\frac{B!}{r!(B-r)!}-\frac{B!}{(r-1)!(B-r+1)!}=\frac{B!(B-2r+1)}{r!(B-r+1)!} \tag{6.19}$$

p. 104
通りとなる．この数は， (6.17)， (6.18) から

$$F=2DT+J\left[\left(\frac{1}{2}B-r\right)\left(\frac{1}{2}B-r+1\right)-\left(\frac{1}{2}B-D\right)\left(\frac{1}{2}B-D+1\right)\right]$$
$$=2DT+J[D(B-D+1)-r(B-r+1)] \tag{6.20}$$

で決められるエネルギーをもった準位の縮退度を与える．ここで， $2D$ は領域II′ にある粒子数である．

これで，元の問題の完全な解が，見つかったわけである．相互作用の強さ J が正であると，基底状態は高度に縮退していて，位置エネルギーは殆んどない．しかし，われわれは，ポテンシャルが引力で，J が負の場合に興味がある．この時基底状態は $r=0$ で縮退がなく，エネルギー

$$E_0=TD+JD(B-D+1) \tag{6.21}$$

をもっている．第一励起状態は，この状態から，エネルギー

$$E_1-E_0=-JB \tag{6.22}$$

だけはなれている．かつ，この励起状態は縮退している．準位が上がって，位置エネルギーが零に近づく時，準位間隔は少しずつせばまり，縮退度は急

激に増加する．量子数 r は，核物理学で，**セニョリティ** (seniority) と呼んでいる量子数の$\frac{1}{2}$である．〝セニョリティ〟という名前をつけたのは，次のような理由からである．すなわち．あるセニョリティをもったエネルギー準位がおこるのは，みたされない殻の中に，少くともその数に等しい粒子が入っている場合のみである．

金属中の二個の電子の間の相互作用の非対角行列成分は，体積に逆比例すると考えられるので，J は体積に逆比例する．一方，B と D は体積に比例する．したがって (6.21) で与えられる基底状態の位置エネルギーは，体積に比例する．基底状態と，第一励起状態の間のエネルギー・ギャップは，(6.22) で与えられるが，これは体積に無関係である．これはまさに，極低温における超伝導体の比熱の指数関数的振舞いを説明するのに必要な結果である．基底状態から励起するのに，他の方法，たとえば，対をこわすやり方などがあるが，これらの過程はすべて全体積に無関係なあるエネルギーを必要とする．

領域IIの大きい状態和を表わす式は，

$$Z_{\mathrm{II}}=\sum_{q=0}^{K}\sum_{r=0}^{\frac{1}{2}(K-q)}\sum_{D=r}^{K-q-r}\frac{2^q K!(K-q-2r+1)}{q!r!(K-q-r+1)!}$$
$$\times\exp\{\beta(\mu-T)(q+2D)-JD(K-q-D+1)$$
$$+Jr(K-q-r+1)]\}\qquad(6.23)$$

p. 105
である．$2K$ は，領域IIにある準位の数，q は半分みたされた準位の対の数である．この表式の，和の中の式の対数は，体積に比例する項だけとると

$$q\log2+K\log K-q\log q-r\log r-(K-q-r)\log(K-q-r)$$
$$+\beta(\mu-T)(q+2D)-\beta JD(K-q-D)+\beta Jr(K-q-r)\qquad(6.24)$$

となる．この式の極大は，次の値でおこる．

$$q=\frac{1}{2}K\mathrm{sech}^2\theta,$$

$$r=\frac{1}{4}K(1-\tanh\theta)^2,$$

$$D=-J^{-1}(\mu-T)+\frac{1}{2}(K-q),$$

$$4\theta=-\beta JK\tanh\theta. \qquad (6.25)$$

とくに興味があるのは，$\mu=T$ の場合である．体積を大きくした極限で（6.23）の右辺の和を，その中の最大項に等しいとおいてよい．（6.24）中の θ に対する方程式は，$-\beta JK$ が K より大きい時にのみ正の解をもつ．β が大きい時（低温），極大は，q，r，D がとりうるはんいの四面体の内部にあるが，β が

$$\beta_c=-4/JK \qquad (6.26)$$

に近づくにつれて，極大は四面体の $q=2r=2D=\frac{1}{2}K$ で与えられる端の点に近づき，高温ではこの点を動かなくなる．粒子数は，$2D+q$ に等しく，いま選んだ μ の値に対してはつねに K である．この模型の面白い特徴の一つは，（6.26）で与えられる転移温度以上で，熱力学的関数がすべて J に無関係になるということである．したがって，系の熱力学的性質は（高温から見ると）転移が実際におきるまで，転移の徴候を全然示さない．そして転移点で比熱の不連続が現われる．

領域 I と III からの，分布関数への寄与は，領域 II の状態とは無関係で，したがってそれらを領域 II からの寄与（6.23）に単にかけるだけでよい．全系の熱力学的関数を得るためには，領域 II に対する熱力学的関数に，相互作用のないフエルミ粒子を含んだ，領域 I と III の熱力学関数を加えなければならない．この模型は，Thouless（1960）によって詳しく論じられた．

5．現実の金属の超伝導状態

実際の金属は，前節で議論した模型とは非常にちがっているが，その相異のために前節の模型の価値が全然なくなってしまうほどに相異が大きいとは
p. 106
思えない．主なちがいを挙げれば，電子が自由でなくて，イオンの作る周期場の中を動くこと，運動エネルギーは領域 II で一定でなくて，通常みられるような様相をもって変化すること，相互作用は一定の行列成分をもった引力という単純なものでないこと，しかもこの相互作用が働くのは，正反対の運

動量をもった粒子間のみとは限らないこと等である.

前節の理論では，金属の格子構造の影響は，全然考慮しなかったけれども，そのために理論を根本的に変更しなければならないと信ずる理由は何もない．この問題がとくに厄介なのは，アルカリ金属のような単純なバンド構造をもった金属は，超伝導にならないということである．週期的構造の主な効果は，自由電子の有効数を変えることと，一粒子スペクトルを変化させることである．これらの効果は，金属に関する別の実験的根拠から，フエルミ面，および電子の有効質量をきめることによって，取り入れることができ，理論を根本的に変える必要はない.

24図の領域IIにおける，一粒子エネルギーの変化は，Bardeen 達（1957）の理論でも考慮されているが，見出された解は，おそらく体積無限大の極限を除いては，厳密でない．これは重大な欠点ではなく，ある適当な極限で，この理論は厳密な解と一致する．Wada 達（1958）および Anderson（1958）のスピン模型を用いると，解を簡単に理解する助けになる　ハミルニアンに対する（6.12）をもっと一般な次式でおきかえる.

$$H_{\mathrm{II}}=\sum_i \epsilon_i(a^\dagger{}_i a_{i+}+a^\dagger{}_{-i-}a_{-i-})+J(\sum a^\dagger{}_{i+}a_-{}^\dagger{}_{i-})(\sum_i a_{-i-}a_{i+}) \qquad (6.27)$$

これに（6.15）で与えられる置きかえを用いると

$$H_{\mathrm{II}'}=\sum_i \epsilon_i(1-2s_{zi})+J[S(S+1)-S_z(S_z+1)]$$

$$=\sum_i \epsilon_i(1-2s_z i)+J\sum_i(S_x s_{xi}+S_y s_{yi}-s_{zi}),$$

$$N_{\mathrm{II}'}=\sum_i(1-2s_{zi}) \qquad (6.28)$$

を得る　われわれは，この系の N の特定の値に対する基底状態を見つけたいので，$H_{\mathrm{II}'}-\mu N_{\mathrm{II}'}$ を極小にしてみよう．各々のスピンには，x, y 成分は一定で，$-JS_x$ と，$-JS_y$ に比例し，z- 成分は $2(\epsilon_i-\mu)+J$ の形で，位置によって変るような磁場が，はたらいている.

スピンの問題が古典的問題であれば，問題は容易に解けて，スピンは外場
p. 107
に平行に並んでしまえばよい　これは，つじつまを合わせる問題になり，方

程式

$$\mathrm{s}_{xi}:\ \mathrm{s}_{yi}:\ \mathrm{s}_{zi}=-JS_x:\ -JS_y:\ 2(\epsilon_i-\mu)+J \tag{6.29}$$

から，

$$J\sum_i [J^2S_x^2+J^2S_y^2+(2\epsilon_i-2\mu+J)^2]^{-1/2}=1 \tag{6.30}$$

が得られる．スピンが量子化されていても，同様な解が正しいものと期待される．i 番目のスピンの (6.29) で与えられる方向の成分は，$\frac{1}{2}$でなければならない．しかし，スピンはこの方向の周りに歳差運動をするから，この歳差運動によるゆらぎを，無視できるときだけ，解は正しくなる．S_z もまたゆらぐから，この解で $N_{\mathrm{II}'}$ は厳密には対角化されなかった点も注意しなければならない．これらのゆらぎは，普通 $\sqrt{N}$ の程度で，大きい系に対しては，多分無視することができる．

(6.29) と (6.30) とにより与えられる基底状態には，見かけ上の縮退が存在する．なぜなら，S_x と S_y とを，別々にきめるものは何もなく，$S_x^2+S_y^2$ だけがきまるからである．xy-面への合成スピンの射影が，どの方向を向いていても，エネルギーは等しい．S_z を対角化するためには，これらの可能なすべての配向の，一次結合をとらねばならない．したがって，この縮退は解における粒子の総数のゆらぎに関係していて，物理的な縮退に関係しない．

粒子の総数に正確な値を与えないこの型の近似解は，有限温度ならばもっと容易に理解される．その場合には，この型の近似が大きいカノニカル集団の性質に対しては，よい近似になっていると見なせるからである．近似の正しさを調べるために，変分法を用いる，有限温度で用いられる変分原理を次節で議論する．

金属中の電子間の真の相互作用については，充分知られていないが，いくつかの定性的な特徴は推測できる．電子間のクーロン反撥のポテンシャルは，勿論完全に知られており，粒子の一つにおきる運動量変化を hq とすると，運動量空間で，それは，行列要素 $4\pi e^2/q^2\mathcal{V}$ をもっている．電子はまた，格子

とも相互作用するが，この相互作用を完全に考慮することは容易でない．Bloch (1928) によって最初に提案され，Fröhlich (1950) によって用いられた方法は，電子内に余分の相互作用を作り出す機構としてだけ考え，それ以外の効果は無視してしまうものである．二個の電子間にフォノンが交換されると，引力を生ずる．これは丁度，二個の核子が中間子を交換して引力を
p. 108 作るのと同じである．フォノンは，フェルミ運動量と同程度の大きい運動量を運ぶこともできるが，そのエネルギーは，フェルミ・エネルギーに比べると小さい．それは，金属のデバイ温度が10^2 度ぐらいであるのに対して，フェルミ温度が10^4 度か，それ以上であることからわかる．このように，フォノンのエネルギーが低いので，最も容易にフォノンを吸ったり，はいたりするのは，フェルミ面近くにある電子であり，したがって電子が24図の領域IIを横切る時のエネルギー変化の大きさは，デバイ温度に κ をかけた程度になるはずである．この量は，フォノンの最大エネルギーにあたる．この議論は，第IX章の3節でもっと詳しく与えられる．行列要素は，電子の初めの運動量と，終りの運動量との間の角にも多少関係するはずであるが，球対称的な部分が，最も重要である．領域IIで，引力ポテンシャルの行列要素を一定と仮定するのはよい近似ではないが，もっと信用できる近似を見つけるのは難しい．Bardeen, Cooper, Schrieffer の理論では，もっと複雑なポテンシャルが，ともかくも取り扱われている．Pines (1958) は，超伝導の実験資料に基づいて，各金属によるポテンシャルのちがいを研究した．

反対の運動量をもった粒子間のポテンシャル以外の行列要素を，無視するのは重大な近似である．このように，他の行列要素を完全に無視して問題を解き，その後で，その値の期待値を求めると，この期待値は小さいことがわかる．この行列要素は小さいけれど，励起スペクトルを定性的に変え，ある系では，エネルギー，ギャップの中に〝集団〟励起状態，すなわち，**励起子**を作る．この問題は，Andersoon (1958) および Bogoliubov とその協力者 (1958) により議論された．『これについては第VIII章8節でもう一度ふれる．』

6. 分配関数に対する変分原理

第3章では，基底状態のエネルギーが，任意の試行波動関数を用いて計算したハミルトニアンの期待値よりは，小さいか等しいという事実を利用する方法を示した．同様な定理が，有限温度にある系の平衡状態にも応用される．この定理は，最初 Peiels (1938) によって証明されたが，ここでは Schultz (1958) の証明を用いる．

$f(x)$ を上に凹な連続関数とすると

$$f(x') \geq f(x) + (x'-x)f'(x) \tag{6.31}$$

が成り立つ．ある演算子 Q の固有関数の完全系を n で区別し，固有値を Q_k とする．任意の完全直交系の組を k で区別し，それと Q の固有状態とのス
p. 109 カラー積 a_{nk} をで表わす．(6.31) から

$$f(Q_k) \geq f(Q_{nn}) + (Q_k - Q_{nn})f'(Q_{nn}). \tag{6.32}$$

したがって次の式が得られる．

$$\begin{aligned}[f(Q)]_{nn} &= \sum_n |a_{nk}|^2 f(Q_k) \\ &\geq \sum_k |a_{nk}|^2 f(Q_{nn}) + \sum_k |a_{nk}|^2 (Q_k - Q_{nn}) f'(Q_{nn}) \\ &= f(Q_{nn}).\end{aligned} \tag{6.33}$$

完全系について和をとると

$$\mathrm{Tr} f(Q) \geq \Sigma f(Q_{nn}). \tag{6.34}$$

特別の場合として，$f(x)=\exp(\beta x)$, $Q=\mu N-H$ にとると，(6.6), (6.5) から

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}\exp[\beta(\mu N - H)] \geq \sum_n \exp[\beta(\mu N_{nn} - H_{nn})] \tag{6.35}$$

が導かれる．和は任意の直交系についてとる．もし，完全系でないと，この不等式の要請はもっと強くなる．

7．準粒子の方法

前節の定理を，(6.29) と (6.30) とで与えられる超伝導の解に，あるいはむしろ，それに対応する有限温度の解に応用することができる．超伝導の問題を，スピンの問題にすりかえた時，解は半古典的解となり，スピンは，スピンごとに異なる，ある“場”に平行に量子化される．この，スピンごとに異なる量子化の方向をきめるには，粒子の消滅演算子を，準粒子の消滅演算子でおきかえればよい．すなわち

$$\alpha_{i0}=x_i^* a_{i+}-y_i\ a_{-}{}^{\dagger}{}_{i-},$$

$$a_{i0}=x_i^* \alpha_{-i-}+y_i a_i^{\dagger}. \qquad (6.36)$$

ただし

$$|x_i|^2+|y_i|^2=1. \qquad (6.37)$$

これら新しい演算子は，粒子の発生，消滅演算子がみたす交換関係と似た交換関係をみたす．

p. 110

$$\{\alpha_{i0},\ \alpha_{j0}\}=\{\alpha_{i0},\ \alpha_{j1}\}=\{\alpha_{i0},\ \alpha^{\dagger}{}_{j1}\}=\text{etc.}=0,$$

$$\{\alpha_{i0},\ \alpha^{\dagger}{}_{j0}\}=\delta_{ij},$$

$$\{\alpha_{i1},\ \alpha^{\dagger}{}_{j1}\}=\delta_{ij}. \qquad (6.38)$$

4節で議論したように，問題をスピン系の問題にすり変えて考え，スピンが z-軸に平行に量子化されているとすると，a_{i+} と a_{-i-} は，i スピンに作用した時，i スピンが上向きの状態にあれば零を与え，$a_{i+}^{\dagger}$ と $a_{-i-}^{\dagger}$ は，i スピンに作用した時，i スピンが下向きの状態にあれば零を与える．スピンは新しい方向に量子化されるとして，その方向を次のように決める．すなわち，上向きの状態にある i スピンに作用した時，α_{i0}，α_{i1} は零を与え，下向きの状態にある i スピンに作用した時，$a^{\dagger}{}_{i0}$ と $\alpha^{\dagger}{}_{i1}$ とは，零を与えるとするのである．この新しい方向を，もとの座標からみた成分は

$$2\mathrm{Re}(x_i y_i),\quad 2\mathrm{Im}(x_i y_i),\quad |x_i|^2+|y_i|^2$$

に等しいことは，(6.15) と (6.36) とを組み合わせてみればわかる．$|\Psi'\rangle$ を，粒子準位 i が占められていない任意の状態とすると，状態

$$|\Psi\rangle=(x_i^*+y_i a^\dagger{}_{i+}a_{-i-}{}^\dagger)|\Psi'\rangle \tag{6.39}$$

では，準粒子準位は占められていない．というのは，この状態に，α_{i0}，α_{i1} を作用させると，零となるからである．準粒子準位が占められている状態は，(6・39) に α_{i0} か α_{i1} を作用させると得られる．この準粒子の方法は，Bogoliubov 達 (1957) と Valatin (1958) によって導入されたが，Bardeen (1957) が用いた方法と同等である．

スピン系の問題の半古典的解は，各スピンの量子化の方向をいったん選んでしまうと，異なるスピン間の相関を無視している．その量子化の方向は，スピンに働いている場の方向によって決まる　これと同等な近似は，変換 (6.36) の係数をいったん選んだ後は，準粒子を異なる準位につめていく時の相関を無視することである．変換の係数は，変分原理からきめるのであるが，同じ結果はスピン模型からも得られるはずである．

最初は，反対のスピンと運動量をもった粒子間の相互作用だけを考慮したが，準位 [j, +] と，[$-j$, −] が占められた配置と，準位 [i, +] と，[$-i$, −] とが占められた配置の間のポテンシャルの行列成分を，ある任意
p. 111
の行列 V_{ij} にとることもできる．ハミルトニアンから，粒子数演算子の μ 倍を引いたものを，(6.36) で定義される準粒子の演算子を用いて書き改めると，

$$\begin{aligned}
H-\mu N=&\sum_i(\epsilon_i-\mu)(a^\dagger{}_{i+}a_{i+}+a^\dagger{}_{-i-}a_{-i-})\\
&\quad+\sum_i\sum_j V_{ij}a^\dagger{}_{i+}a_{-i-}^{\dagger}a_{-j-}a_{j+}\\
=&\sum_i(\epsilon_i-\mu)[2|y_i|^2+(|x_i|^2-|y_i|^2)(\alpha^\dagger{}_{i0}\alpha_{i0}+\alpha^\dagger{}_{i1}\alpha_{i1})\\
&\quad+2x_i^*y_i\alpha^\dagger{}_{i0}\alpha^\dagger{}_{i1}+2x_iy_i^*\alpha_{i1}\alpha_{i0}\\
&+\{\sum_i\sum_j V_{ij}x_i^*y_i^*[x_jy_j-x_jy_j(\alpha^\dagger{}_0\alpha_{j0}+\alpha^\dagger{}_{j1}\alpha_{j1})\\
&+x_j^2\alpha_{j1}\alpha_{j0}-y_j^2\alpha^\dagger{}_{j0}\alpha^\dagger{}_{j1}]+\text{Hermitian conjugate}\}\\
&+\sum_i\sum_j V_{ij}B^\dagger{}_iB_j-\sum_i\sum_j V_{ij}x_i^*y_i^*x_jy_j
\end{aligned} \tag{6.40}$$

となる．ここで

$$B_i = a_{-i-}a_{i+} - x_i y_i$$
$$= -x_i y_i(\alpha^\dagger_{i0}\alpha_{i0} + \alpha^\dagger_{i1}\alpha_{i1}) + x_i^2\alpha_{i1}\alpha_{i0} - y_i^2\alpha^\dagger_{i0}\alpha^\dagger_{i1} \tag{6.41}$$

である．行列成分 V_{ij} は $\mathcal{V}^{-1}$ に比例するから，$\sum_i(\epsilon_i - \mu)$ のような項に比べて，$\sum_i V_{ij}$ のような項は無視できる．(6.40) の右辺の対角線部分は，

$$(H-\mu N)_D = \sum_i(\epsilon_i - \mu)\,[2|y_i|^2 + (|x_i|^2 - |y_i|^2)(n_{i0} + n_{i1})]$$
$$+ \sum_i\sum_j V_{ij}x_i^* y_i^* x_j y_j (1 - n_{i0} - n_{i1})(1 - n_{j0} - n_{j1}) \tag{6.42}$$

である．n_{i0} と n_{i1} とは，準粒子の数演算子である．この演算子の指数関数の跡を，厳密に計算することは，不可能なので，運動量空間の各領域を，準粒子が一定の割合で占めるような配置に限ることにする．すなわち，準粒子間の相関は重要でないと仮定しているのである．$(n_{i0}+n_{i1})$ が 2 になる確率を f_i，0 になる確率を g_i とする．そのような配置にあるときの $H-\mu N$ の期待値は

$$\langle(H-\mu N)_D\rangle = \sum_i(\epsilon_i - \mu)\,[1 + (|x_i|^2 - |y_i|^2)(f_i - g_i)]$$
$$+ \sum_i\sum_j V_{ij}x_i^* y_i^* x_i y_i (f_i - g_i)(f_j - g_j) \tag{6.43}$$

で与えられる．

運動量空間を細胞に分割し，各細胞には w_α 対の準粒子準位があるようにすると，一つの細胞中の準位のうち，$f_\alpha w_\alpha$ 対は二重に占められ，$(1-f_\alpha-g_\alpha)w_\alpha$ 対は一重に占められ，$g_\alpha w_\alpha$ 対は空である．この性質をもった異なる配置の数は，

$$\prod_\alpha \frac{w_\alpha!\,2^{w_\alpha(1-f_\alpha-g_\alpha)}}{(w_\alpha f_\alpha)!\,(w_\alpha g_\alpha)!\,[(1-f_\alpha-g_\alpha)w_\alpha]!}$$

だけある．$\mathcal{Z}$ の試行値は，この数と，(6.43) に $-\beta$ をかけて指数関数にしたものとの積である．上に与えた数の対数に，Boltzmann 定数 κ をかけたものは，エントロピー S に対する試行値を与える．ゆえに

$$S\,T=-\kappa T\sum_i\{f_i\log f_i+g_i\log g_i$$
$$+(1-f_i-g_i)\log\left[\frac{1}{2}(1-f_i-g_i)\right]\Big\} \tag{6.44}$$

(6.43) が $E-\mu\overline{N}$ に対する試行値を与え，Peierls の定理 (6.35) によって，(6.44) と (6.43) の右辺の差が，$p\mathcal{V}=\mu\overline{N}+ST-\overline{E}$ の厳密な下限を与えることがわかる．この差を，f_i と g_i について偏微分すると，$p\mathcal{V}$ が最大値をとるための条件式が，次のように得られる．

$$-\kappa T\left\{\log f_i-\log\left[\frac{1}{2}(1-f_i-g_i)\right]\right\}=(\epsilon_i-\mu)(|x_i|^2-|y_i|^2)$$
$$+2\mathrm{Re}\sum_j V_{ij}x_i^*y_i^*x_jy_j(f_j-g_j),$$
$$-\kappa T\left\{\log g_i-\log\left[\frac{1}{2}(1-f_i-g_i)\right]\right\}=-(\epsilon_i-\mu)(|x_i|^2-|y_i|^2)$$
$$-2\mathrm{Re}\sum_j V_{ij}x_i^*y_i^*x_jy_j(f_j-g_j). \tag{6.45}$$

これら二つの方程式を加え合わせると，

$$4f_ig_i=(1-f_i-g_i)^2. \tag{6.46}$$

したがって

$$f_i=\frac{1}{4}\left[1-\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\nu_i\right)\right]^2,$$
$$g_i=\frac{1}{4}\left[1+\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\nu_i\right)\right]^2,$$
$$1-f_i-g_i=\frac{1}{2}\mathrm{cosech}^2\left(\frac{1}{2}\beta\nu_i\right) \tag{6.47}$$

と書くことができる．ν_i は (6.45) から次の如くきまる．

$$\nu_i=(\epsilon_i-\mu)(|x_i|^2-|y_i|^2)-2\mathrm{Re}\sum_j V_{ij}x_i^*y_i^*x_jy_j\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\nu_j\right) \tag{6.48}$$

(6.47) を，(6.44) と (6.43) とに代入し，その差を副条件 (6.37) を考慮して，x_i^* と y_i^* について偏微分すると，$p\mathcal{V}$ が最大値をとるための条件式が次のように求められる．

p. 113

$$-(\epsilon_i-\mu)\ |x_i|^2\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\nu_i\right)$$
$$+\sum_j V_{ij}x_i^* y_i^* x_j y_j \tanh\left(\frac{1}{2}\beta\nu_i\right)\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\nu_j\right)=\lambda_i|x_i|^2,$$
$$(\epsilon_i-\mu)|y_i|^2\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\nu_i\right)$$
$$+\sum_j V_{ij}x_i^* y_i^* x_j y_j \mathrm{than}\left(\frac{1}{2}\beta\nu_i\right)\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\nu_j\right)=\lambda_i|y_i|^2. \quad (6.49)$$

これは次の解をもっている.

$$|x_i|^2-|y_i|^2=(\epsilon_i-\mu)/\nu_i.$$
$$4|x_i y_i|^2=1-(\epsilon_i-\mu)^2/\nu_i^2, \quad (6.50)$$

これらの方程式は，パラメタ $\Delta_i=2x_i y_i \nu_i$ を導入して書き改めると

$$x_i y_i=\Delta_i/2\nu_i,$$
$$|x_i|^2-|y_i|^2=(\epsilon_i-\mu)/\nu_i,$$
$$\nu_i^2=(\epsilon_i-\mu)^2+|\Delta_i|^2 \quad (6.51)$$

となり，(6.48) と (6.49) とから，Δ_i に対する方程式が次の形に得られる.

$$\Delta_i=-\sum_j V_{ij}(\Delta_j/2\nu_j)\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\nu_j\right). \quad (6.52)$$

ν_i は，準粒子 i のエネルギーと解釈される. 第一に，準粒子準位が，一重または二重に占められる確率は，エネルギー $\mu+\nu_i$ をもつフェルミ粒子準位の一対が，一重または二重に占められる確率に等しい. 第二に，(6.43) からわかるように，準位 i の準粒子を，(6・47) で与えられる平衡分布につけ加えると，$\overline{E}-\mu\overline{N}$ は (6.48) によって

$$(\epsilon_i-\mu)(|x_i|^2-|y_i|^2)+2\mathrm{Re}\sum_j V_{ij}x_i^* y_i^* x_j y_j \tanh\left(\frac{1}{2}\beta\nu_j\right)=\nu_i, \quad (6.53)$$

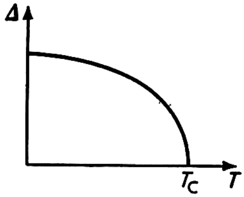
だけ増加する.

簡単な場合として，フェルミ面に近い領域で，$V_{ij}=-V_0/\mathcal{V}$，それ以外では $V_{ij}=0$ ととろう. すると，パラメタ Δ_i は，(6.52) によってこの領域で一定となる. この定数 Δ を. エネルギー・ギャップと呼ぶ. なぜなら，(6.51) によると，ν_i の最低値は Δ であるから，方程式 (6.52) は，

$$V_0 N(0)\int\frac{\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{(\epsilon-\mu)^2+\Delta^2}\right)}{2\sqrt{(\epsilon-\mu)^2+\Delta^2}}d\epsilon=1 \qquad (6.54)$$

となる．$N(0)$は単位エネルギーあたりの状態密度で，Mを電子の有効質量
p. 114
とすると，　$Mk_F/2\pi^2\hbar^2$ に等しい．積分には，　μ に非常に近い ϵ の値だけが利くので，$N(0)$ は一定と仮定する．5 節で述べた理由から，積分の上，下限は $|\epsilon-\mu|$ が $\kappa\Theta$ の程度になる点で与えられる．Θ は Debye 温度である．上，下限附近では，　$\tanh\left(\frac{1}{2}\beta\sqrt{(\epsilon-\mu)^2+\Delta^2}\right)$は殆んど 1 に近いから，積分の値は，上，下限に対数関数的に依存する．

この模型と，実際の超伝導体との関係，および模型の性質と，超伝導体の物理的性質との比較は，Bardeen 達 (1957) によって議論された．(6.54) で与えられるエネルギー・ギャップは，25図に示すように，温度とともに減少する．臨界温度 T_C で，エネルギー・ギャップは零になり，したがって (6.54) によれば，臨界温度は次できめられる．



25図　温度Tの関数として表わしたエネルギー・ギャップΔ.

$$\frac{1}{2}V_0 N(0)\int\tanh\left[\frac{1}{2}\beta_c(\epsilon-\mu)\right](\epsilon-\mu)^{-1}d\epsilon=1. \qquad (6.55)$$

この温度以上では，方程式 (6.54) は，$\Delta=0$ 以外の解をもたない．この単純な解，$\Delta=0$ はつねに存在するが，これが $p\mathcal{V}$ の極大を与えるのは，$\Delta\neq0$ なる解が存在しない時のみである．Δ_i が零であると，x_i か y_i かが零になり，準粒子は，空孔か粒子かのいずれかと同じものになる．V_0N (0) がどんなに小さくても，(6.55) の解はつねに存在する．それは積分が，β_c の単調変化関数で，β_c が零に近づけば，β_c に比例して 0 になり，β_c が無限大になれば，対数的に発散するからである．

きっちりと反対の運動量をもたない電子間の相互作用は，基底状態のエネルギーまたは圧力に重要な寄与をするが，転移の性質にはあまり大きい影響

を与えない．Bardeen 達（1957）が示したように，その期待値は，正常状態でも，超伝導状態でも殆んど変らない．それゆえ，このポテンシャルの行列要素を無視した理論は，基底状態エネルギーに対しては，非常に悪い近似にちがいないが，正常状態と基底状態の差に対しては，よい近似を与える．しかも，実験的に容易に測定されるのは，この差にほかならないのである．

この理論には，本質的に唯一つだけ自由なパラメタがあり，それは $V_0N(0)$
p. 115 である．大抵の物理的性質，たとえば絶対零度におけるエネルギー，ギャップ，臨界磁場などは，この一個のパラメタでかなりよく合わせられる．若干困難な点が残ってはいるが，理論と実験との一般的な一致は，際立ってよい．理論の解説が，Bardeen と Schrieffer（1961）により，与えられている．

『準粒子の方法をハートリー・フォックの方法の一つの一般化とみなすと有用である．これに対する議論は，Bogoluibov（1959）の総合論文に与えられており，そこに用いられている方法は Gorkov（1958）によって提案されたのと似ている．第II章4節で示したように，単一の行列式で表わされる状態は，その一体密度行列で指定することができ，すべての高次の密度行列はいったんこれがわかればすべて計算することができる．同様な近似は熱平衡にある独立粒子の系に対しても成立つ．準粒子の真空，すなわち超伝導体の基底状態は，密度行列だけでは完全にはきまらないで，対を作る関数 $\varkappa$ にも依存する．$\varkappa$ は配置空間では，密度行列に対する（2.19）式に対応して

$$\varkappa(\mathbf{r}, \mathbf{r}')=\langle\Psi|\psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r})|\Psi\rangle \tag{6.56}$$

と書かれる．配置空間でそれは $\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ がはなれると 0 になる関数で，それが 0 でない $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ の範囲を相関距離と呼んでいる．運動量空間では 0 でない行列成分

$$\begin{aligned}\varkappa(-i-, i+)&=\langle\Psi|(x_i\alpha_{i0}+y_i\alpha^\dagger_{i1})(-y_i\alpha^\dagger_{i0}+x_i\alpha_{i1})|\Psi\rangle\\&=-x_iy_i,\\ \varkappa(i+, -i-)&=x_iy_i\end{aligned} \tag{6.57}$$

をもち，一方密度行列は（6.36）から知れるように 0 でない行列成分

$$\rho(i+, i+)=\rho(-i-, -i-)=|y_i|^2 \tag{6.58}$$

をもっている．高次の密度行列は密度行列と対関数とによって完全にきめられる．生成および消滅演算子の積の期待値を計算する規則は，その積を演算子の対の組に，あらゆる可能なしかたで分解し，おのおのの対をその期待値ですりかえることである．これは Wick の定理の一般化と見なすことができる．例えば，二粒子密度行列は (2.22) によって

$$\begin{aligned}\Gamma(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1'\mathbf{r}_2')&=\frac{1}{2}\langle\Psi|\psi^\dagger(\mathbf{r}_2')\psi^\dagger(\mathbf{r}_1')\psi(\mathbf{r}_1)\psi(\mathbf{r}_2)|\Psi\rangle\\ &=\frac{1}{2}\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1')\rho(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2')-\frac{1}{2}\rho(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2')\rho(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_1')\\ &\quad+\frac{1}{2}\chi(\mathbf{r}_1'\mathbf{r}_2')\chi(\mathbf{r}_2\mathbf{r}_1)\end{aligned} \tag{6.59}$$

となる．

(6.36) で与えられる準粒子変換は，けっしてこの種の最も一般的な変換ではない．というのは，平面波以外の状態を表示の基底として用いることができ，同じようにして対をつくれるからである，このとき対関数と密度行列は (6.57) (6.58) で与えられる形ではなくて，密度行列はエルミット行列，対関数は反エルミット行列でなければならず， Valatin (1961) が示したように，それらは次の方程式をみたさなければならない．

$$\begin{aligned}\rho&=\rho^2+\chi\chi^\dagger,\\ \rho\chi&=\chi\rho^\dagger.\end{aligned} \tag{6.60}$$

一般化したハートリー・フォック方程式は，$H-\mu N$ の期待値を (6.59) を用いて計算し，それを (6.60) を副条件として極小にすることによって得られる．

この方式は， Maki と Tsuneto (1962) が示したように，磁束の量子化を示すのに用いることができる．論法は 3 節で与えた London の論法と同様である．密度はゲージ不変な量であるが，対関数は電子の消滅演算子を 2 個含むので，電子の電荷の 2 倍をもった荷電粒子系の波動関数と同じようにゲージ変換を受ける．もし超伝導体のエネルギーが変わらないはずならば，

(6.11a) で与えられるベクトル・ポテンシャルを導入したとき，対関数は

$$\chi(\mathbf{r},\mathbf{r}')\to\chi(\mathbf{r},\mathbf{r}')\exp\left\{\frac{ie}{\hbar c}[u(\mathbf{r})+u(\mathbf{r}')]\right\} \qquad (6.61)$$

のごとく変換されなければならない．対関数は $\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ がはなれたとき 0 になるから，この値が $\mathbf{r}$ だけをリングに沿って一周したとき元にもどることを要求すべきでなくて，$\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ の両方が超伝導体内の一つの回路を一周したときに元の値にもどるべきである．従って磁束，すなわち u の変化は $hc/2e$ の倍数でなければならない．

(6.56) で定義されるような対関数を解釈するのに少し困難がある．このような量は，粒子数がよい量子数になっているような系に対して厳密には 0 であるはずである．しかし Bogoliubov (1959) が注意したように，(6.59) 式はそのような系でも近似的に正しいと思われる．そうならば二粒子密度行列は，一対の点 $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ が接近しており同時に一対の点 $\mathbf{r}_1'$ と $\mathbf{r}_2'$ が接近しておれば，これら二組の対がどんなにはなれていようと大きい値をもっている．この種の相関は超伝導あるいは超流動系に特有のものに見えるが，Yang (1962) によって“**非対角的長距離秩序**(off-diagonal long range order)”と名づけられた．これが二粒子密度行列に大きな固有値をもたせるのである．対応する固有ベクトルは対関数であるから，χ は方程式

$$\iint\Gamma(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2|\mathbf{r}_1'\mathbf{r}_2')\chi(\mathbf{r}_1'\mathbf{r}_2')d^3\mathbf{r}_1'd^3\mathbf{r}_2'=\alpha N\chi(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2) \qquad (6.62)$$

によって定義することができる．ここに N は系中の核子の数，α は 1 より小さいが 1 に近い数である．』

8. 液体 He^3 の超流動性

他の多フェルミ粒子系においても，もし粒子間に引力があれば，同様な相転移がおこるかもしれないことを，超伝導の理論は暗示する．一般のポテンシャルに対して，方程式 (6.52) を解くことは不可能であるが，この方程式を変分原理の形にして，もしある試行波動関数が，ある量の期待値を負にす

るならば，転移が起こらない――というようにすることはできる．ポテンシャルの反撥部分の強い影響のために，液体 He^3 に対し球対称的な Δi を使って変分原理を満足させることが，不可能なことはわかっているが，四重極的対称性（D-波）をもった Δi によれば，変分原理がみたされることが，Emery と Serrlen (1960) により見出された．同様な結果は，少し異なった議論を用いて，Brueckner と協力者 (1960b) により得られている．このような結果が得られる理由は，D 波が，S 波ほどには深くポテンシャルの反撥部分に侵入しないからである．『予想された転移温度は設けた仮定に敏感に依存し，したがって Gorkov と Pitaevokii (1962) は 10^{-3} 度という低い値を与えているのに対し，Bardasis と Schrieffer (1961) は 2×10^{-2} 度を与えている．実際実験測定は 10^{-2} 度までなされたが (Anderson 達 1961c) なんの変化も見出されなかった．』

この予想された相は興味深い性質をもっており，Anderson と Morel (1961) によって議論された．方程式 (6.52) 中のポテンシャル V_{ij} が球対称であるとすると，臨界点において ν_i は $\varepsilon_i-\mu$ に等しく，(6.52) の解は角運動量の固有関数でなければならない．S- 状態でも強い引力があると，球対称性をもつ解は臨界温度として最大の値をもつものになり，Δ_i は球対称であるから ν_i も球対称である．しかし D- 状態の引力が大きいと臨界温度において Δ_i は球面調和関数 Y_{2m} と同じように i の方向に依存する．臨界温度以下では ν_i はもはや球対称でなくなり，従って (6.52) の解はもはや角運動量の固有関数ではなくる．Anderson と Morel (1961) はこの場合最低エネルギーを与える (1652) の解は等軸性 (cubic) 対称をもち，これは対関数の対称性でもなければならないことを見出した．エネルギー・ギャップ Δ_i は，運動量空間の球上 8 個の節点で消えなければならない．異方性をもった流体の存在の予言は不思議に見えるが，存在しないという基本的理由はない．

液体ヘリウム 3 のような中性の系は超伝導体にはなり得ないが，このような相では超流動体であるだろう．(6.62) で定義されるような 0 でない対関

数の存在がこのことを保証する．相関距離にくらべて大きいひろがりをもった流体の大きなトーラスを考える．平衡状態において $\varkappa(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は無限大の系に対すると同じように $\mathbf{r}+\mathbf{r}'$ に関係しないものと予想される．波動関数に

$$\exp\left[\frac{iM}{\hbar}\sum_{j=1}^{N} S(\mathbf{r}_j)\right]$$

をかけることによって，量子系に渦なしの流れをつけ加えることに常に可能である．ここに grad $S(\mathbf{r})$ は点 $\mathbf{r}$ における平均速度である．これは対関数に $\varkappa(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ を

$$\varkappa(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \ \exp\left\{\frac{iM}{\hbar}\left[S(\mathbf{r})+S(\mathbf{r}')\right]\right\}$$

に変える効果がある．これは荷電系に対するゲージ変換（6.61）と比較されるべきものである．対関数は $\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ を流体中の回路に沿って一周させたとき元の値にもどらなければならないが，そのときの S の変化は単に循環

$$\Delta S = \oint \mathbf{v}\cdot d\mathbf{r}$$

になる．この条件は循環（circulation）が $h/2M$ の倍数であることを意味している．循環が量子化されるから，回転流をもつ流体はその循環を連続的に減少させることができず，ある量子状態から別の量子状態へ移行するにはあるエネルギーの障壁を越す必要があり，永続流動が可能になる．』

9．原子核における対形成の影響

Mayer（1950）の計算によって，核子間の短距離引力は，角運動量零の安定な核子の対をつくることが示された．同じ殻模型の準位にある二個の粒子の相互作用エネルギーが，δ- 関数型ポテンシャルならば，角運動量が 0 になるように結合する方が，角運動量が 2 になるように結合するより，4 倍大きい．『閉殻の外側に 2 個の同種の粒子をもった核は 0 の角運動量をもつ．第三の粒子はよい近似ではじめの対を邪魔することなく，一定の角運動量を

もった準位へ入り，従って核の角運動量は奇数番目の粒子の角運動量に等しい．第四番目の粒子は三番目の粒子と結合して角運動量0の第二の対をつくることができる．短距離引力によって引起されるこの対形成の物理的帰結は，偶数個の陽子と中性子をもった核は角運動量が0，偶の偶奇性をもった基底状態を，また奇数の質量数をもつ核は基底状態で一般に奇数番目の核子の角運動と偶奇性に等しい角運動量と置換性をもち，偶数核の方が奇数核よりもより強く結合しているということである．

もしも同種の粒子の p 対がそれぞれ波動関数 $f(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2)$ で記述される状態にあって基底状態 $|\Phi_0\rangle$ にある閉殻核に加えられたとすると，結果する状態は

$$|\Psi\rangle=[\iint f(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2)\psi^\dagger(\mathbf{r}_1)\psi^\dagger(\mathbf{r}_2)d^3\mathbf{r}_1d^3\mathbf{r}_2]^p|\Phi_0\rangle \qquad (6.64)$$

となる．ただし ψ^+ は粒子の生成演算子である．特に簡単な場合として関数 f が殻模型における一部の殻状態からだけつくられているときには

$$f(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2)=\sum_{m=-1/2}^{j}\varphi_{jm}(\mathbf{r}_1)\varphi_{j-m}(\mathbf{r}_2)$$

となり，$|\Psi\rangle$ は

$$[\sum_{m=1/2}^{j}a^\dagger{}_{jm}a^\dagger{}_{j-m}]^p|\Phi_0\rangle \qquad (6.65)$$

に比例する．これは本質的に4節で考えた系の基底状態と同じもので，したがってそこで考えた模型は核物理学において重要な応用をもつことになる．(6.64) に書き下した一般の形の状態は扱いが容易でないが，超伝導理論に用いられた型の波動関数に密接に関係している．もし関数 f が

$$f(\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2)=\sum_j\sum_{m=1/2}^{j}(y_j/x_j^*)\varphi_{jm}(\mathbf{r}_1)\varphi_{j-m}(\mathbf{r}_2) \qquad (6.66)$$

と書けるならば，状態

$$|\Psi'\rangle=\exp\{\sum_j\sum_{m=1/2}^{j}(y_j/x_j^*)a_{jm}^+a_{j-m}^+\}\ |\Phi_0\rangle \qquad (6.67)$$

はことなる粒子数を含む状態の重ね合わせになるが，閉殻の外側に $2p$ 個の粒子がある部分は（規格化定数を別にすれば）状態 (6.64) と同じである．

(6.63) で定義される状態は，準粒子変換

$$\alpha_{jm}=x^{\dagger}{}_{j}a_{jm}-y_{j}a^{\dagger}{}_{j-m} \tag{6.68}$$

対する準粒子の真空にあたる．物理量の期待値は単に粒子の演算子で書き変えることによって計算される．

Belyaev (1959) はこの準粒子の方法を，殻模型においていくつかの殻準位にまたがる 対形成を考慮するために 用いた.』この方法は大変便利で，かなり簡単な結果に導くが，近似的に得る基底状態，すなわち準殻子に対する真空は，粒子数の異なる状態の重ね合わせになり，そのため，結果を解釈する際，少々困難が生じてくる．対形成の効果は，励起状態に余り影響を与えることなしに，基底状態のエネルギーを下げることで，そのため，簡単な殻模型から予想されるよりも遙かに大きいエネルギー・ギャップが，基底状態と，第一励起状態との間 をへだてる． Belyaev が示したように， エネルギー準位が変化するから， 種々の， 他の物理的性質も変化する． たとえば， 変形した核の慣性能率は減少する．対形成の最も重要な効果は，エネルギー準位の間隔を増すことによって，独立“粒子”模型を改良する点であるが，ここで独立核子とよばれているものは，準粒子であって，物理的粒子ではない.『実際これらの問題の多くで集団運動に対する対形成の影響が問題になる．核物質におけるこれらの問題を扱う適当な方法は Baranger (1961) によって記述されている.』

p. 117

第IV章 9 節に議論した， Brueckner の K 行列の発散は， この結果と密接に結びついている． 実際． (4.52) 式の右辺の和が発散する条件が，ちょうど方程式 (6.55) が引力の場合つねに解をもつ条件なのである.『Emery と Sessler (1960b) は，核物質の基底状態は観測されている核力を用いると超流動体であるはずだが，予想される対エネルギーは重い核に対して解測されているものよりも著しく小さいことを見出した．しかし平衡状態よりも小さい密度では，対形成の影響はより強いはずで，したがっておそらく核の表面領域の方が中心部分よりよりきいて，対形成が核物質よりも現実の核における方が強くなる.』

“The Many-Body Problem” の中で，超伝導理論については，Schrieffer と Belyaev がその核理論への応用については，Mottelson と Belyaev が，また，超伝導の実験的諸事実については，Lynton が議論している．

第VII章　有限温度における摂動論

1.　Bloch の方程式

p. 119
摂動論は，系の基底状態を調べるのに有用であるのと同じ理由で，有限温度で平衡にある系の研究にも有用である．系に加えられた小さい外場の影響を計算するのにも用いられるし，ある特定の近似が，系の平衡状態に対してどれほど良い近似であるかを評価するのにも役立つ．また，単純な系の平衡状態を知って，それからもっと複雑な系の平衡状態に対する表式を求めるための系統的な方法も，摂動論によって与えられる．これらの用途のうち，最後に述べたものに主として注目して来たが，他の二つも同様に重要である．

有限温度における摂動級数を得るために，分布関数に対する Bloch の方程式 (6.7) と，波動関数，または，変換関数 (4.9) に対する，時間を含む Schrödinger の方程式の間の類似を利用する．$H-\mu N$ を，無摂動部分と，摂動の二つに分けるのが便利である．

$$H-\mu N=H_0+H_1 \tag{7.1}$$

普通，粒子数演算子の部分は，摂動項 H_1 の中に含めないが，Bardeen 達 (1957) の超伝導理論の精度を評価したいときは，粒子数演算子の一部を摂動として扱わなければならない．それは，無摂動ハミルトニアン (6.42)
p. 120
が，粒子数演算子と可換でないからである．(4.13) に対応する展開は，

$$\exp(\beta H_0)\psi=1-\int_0^\beta \exp(H_0u_1)H_1\exp(-H_0u_1)du_1$$
$$+\int_0^\beta du_2\int_0^{u_2}du_1\exp(H_0u_2)H_1\exp(-H_0u_2)\exp(H_0u_1)H_1\exp(-H_0u_1)\cdots\cdots$$

$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}\int_0^{\beta}\cdots\cdots\int_0^{\beta}T[H_1(-iu_n)\cdots H_1(-iu_2)H_1(-iu_1)]\,du_1\cdots du_n \tag{7.2}$$

で与えられる．ここで，相互作用表示による“時間依存をもつ”演算子は

$$H_1(-iu)=\exp(H_0u)H_1\exp(-H_0u) \tag{7.3}$$

で定義される．T で表わした，時間の順序づけをした積（T-積）は，演算子を，その変数の虚数部分が大きいものから小さいものへと順に，左から右へ並べた積で定義する．Schrödinger 方程式との類似から，変数を“時間”と呼ぶ．実際には，その変数は物理的時間とは何の関係もなく，温度の逆数と関係がある．次の記号を用いる．

$$Q(-iu)=\exp(H_0u)Q\exp(-H_0u)\ ,$$
$$\widetilde{Q}(-iu)=\exp(H_0u)Q^{\dagger}\exp(-H_0u)\ . \tag{7.4}$$

$\widetilde{Q}(-iu)$ は，$Q(-iu)$ のエルミート共役でなく，むしろ $Q(iu)$ の共役である．

2. つながったグラフによる展開

第Ⅳ章で導入したグラフ法の技法は，ここでも用いられる．(6.6) と (7.2) から計算された分配関数を求めるのに，Wick の定理を使う方法が，Matsubara (1955) により提案された．この方法は，相互作用のあるフェルミ粒子系にも，ボーズ粒子系にも応用できるが，われわれは，二体力で相互作用し，(4.19) で与えられるハミルトニアンをもつフェルミ粒子系への応用を考える．

(7.2) の T-積に現われる演算子は，発生，および，消滅演算子の積である．(7—4) で定義される，時間による消滅演算子を，相互作用表示で書くと次のようになる．
p. 121

$$a_k(-iu)=a_k\exp[-(\epsilon_k-\mu)u]\ ,$$
$$\tilde{a}_k(-iu)=a_k^{\dagger}\exp[(\epsilon_k-\mu)u]\ . \tag{7.5}$$

ϵ_k は，運動量 k をもつ粒子の無摂動エネルギーである．

第IV章では，N 積を，“真空”におけるその期待値が0になるように定義した．そして Wick の定理を使って，T-積を，コントラクションと，N-積の和に分解した．コントラクションはただの数であるが，N-積は零の期待値をもつので，何の寄与もしない．(7.2) に与えられた展開から，$\mathcal{Z}=\mathrm{Tr}\,\psi$ を求めるのにこれと同じ方法を用いるためには，N-積の定義を次のようにしなければならない．すなわち，各対角要素に因子 $\exp(-\beta H_0)$ で重みをつけた時，N-積の期待値が零にならねばならない．そのために，少し細工して，T-積中に現われる各々の消滅演算子と，発生演算子とを，次のように二つの部分に分ける．

$$
\begin{aligned}
a_k &= (1-g_k)\alpha_{1k}+g_k\alpha^{\dagger}_{2k} \\
a^{\dagger}_k &= (1-g_k)\alpha^{\dagger}_{kk}+g_k\alpha_{2k}
\end{aligned}
\tag{7.6}
$$

ただし，g_k はある実数である．これは，(6.36) のようなカノニカル変換ではなく，α_{1k} も $a^{\dagger}_k$ も，おのおの a_k と同じ演算子である．ただ，このような分離をする目的は，N-積を，上に述べたように適当に定義するためである．多くの発生演算子と，消滅演算子との N-積をつくるには，まず (7.6) を代入し，次に演算子を並びかえて，$\alpha^{\dagger}_1$ が最も左に来て，次に，$\alpha^{\dagger}_2$，その次に α_2，そして一番右に α_1 が来るようにする．入れかえを一度やるごとに，符号が変わる．並べ変えが完了したら，α_{1k} と $\alpha^{\dagger}_{2k}$ は a_k で，$\alpha^{\dagger}_{1k}$，α_{2k} は $a^{\dagger}_k$ でおきかえる．

まず，このように定義した N-積が，実際に平均値零をもつことを，証明しなければならない．重みの因子

$$
\exp(-\beta H_0)=\exp\left[-\beta\sum_k(\epsilon_k-\mu)a^{\dagger}_k a_k\right]
$$

をかけて，すべての対角要素を加え合わせる．各々の準位は，占められているか，空いているかのどちらかで，この二つの場合における重みの因子の比は，$\exp[-\beta(\epsilon_k-\mu)]$ である．種々の準位に対応する発生演算子と，消滅演算子を一つづつかけ合わせた積に対して，各準位が，独立な因子を与える．したがって，同じ準位にある粒子を，作ったり消したりする演算子ばかりの

N-積を考えれば充分である．発生演算子の数が，消滅演算子の数に等しく
p. 122
ない場合は，積のすべての対角成分は消える．一つの発生演算子と，一つの消滅演算子がある場合の N-積は，

$$N[a^\dagger{}_k a_k] = (1-g_k^2)\alpha^\dagger{}_{1k}\alpha_{1k} + g_k(1-g_k)\alpha_{2k}\alpha_{1k}$$
$$+(1-g_k)g_k\alpha^\dagger{}_{1k}\alpha^\dagger{}_{2k} - g_k^2\alpha\alpha^\dagger{}_{2k}\alpha_{2k}$$
$$=(1-g_k^2)a^\dagger{}_k a_k - g_k^2 a_k a^\dagger{}_k \qquad (7.7)$$

である．この平均値は，g_k^2 を

$$g_k^2 = f_k = \{\exp[\beta(\epsilon_k-\mu)]+1\}^{-1} = \frac{1}{2}\left\{1-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_k-\mu)\right]\right\} \qquad (7.8)$$

ととった時に消える．これは無摂動系において，準位 k が占められる確率である．同じ準位 k についての演算子が二つ以上ある時も，N-積が消えることを証明するために，N-積の中のフェルミ粒子演算子を入れかえたとき，N-積の符号が変わるという事実を用いる．したがって，

$$N[a^\dagger{}_k a_k^\dagger a_k a_k] = -N[a_k^\dagger a_k^\dagger a_k a_k] = 0 \qquad (7.9)$$

となる．同じ準位に対する演算子が，4個以上含まれている N-積についても，同様である．

二つの演算子のコントラクションは，それらの N-積と，T-積の差として定義され，ただの数である．二つの発生演算子，または，二つの消滅演算子のコントラクションは消え，一つの消滅演算子と，一つの発生演算子のコントラクションは，(7.5)，(7.7)，(7.8) によって，

$$a_k(t_2)^\bullet \tilde{a}_{k'}(t_1)^\bullet = T[a_k(t_2)\tilde{a}_{k'}(t_1)] - N[a_k(t_2)\tilde{a}_{k'}(t_1)]$$
$$= \begin{cases} (1-f_k)\delta_{kk'}\exp[(\epsilon_k-\mu)(t_1-t_2)], & t_1<t_2 \text{ の時,} \\ -f_k\delta_{kk'}\exp[(\epsilon_k-\mu)(t_1-t_2)], & t_1 \geqq t_2 \text{ の時} \end{cases} \qquad (7.10)$$

となる．これを，(4.28)，(4.29) とくらべると，有限温度においては，準位 k は，確率 f_k で占められた準位のように振舞い，確率 $1-f_k$ で空いた準位のように振舞うことがわかる．

Wick の定理を使って，$\mathcal{Z}$ に対する摂動展開のグラフ表示を得るが，それ

は第IV章で議論した $\langle \Phi_0 | U(t) | \Phi_0 \rangle$ に対する摂動展開のグラフ表示と，非常によく似ている．0 と β の間に，バーテックスをもつすべての可能なグラフを画く．各バーテックスには，相互作用の行列成分に等しい因子を，フェルミ線に対しては，(7.10) で与えられる因子を，フェルミ線の閉じたループの各々に対しては，因子 (−1) を，それぞれ対応させる．

ここでもまた，グラフのつながっていない部分は，独立な因子を寄与する事実を利用する．すべてのグラフの和は，すべてのつながったグラフの和の，p. 123指数関数に等しい．したがって圧力に対する摂動級数は，(6.4) により，すべてのつながったグラフの和で与えられる．この方法の議論は，Bloch と De Dominicis (1958) とによってなされた．同様の方法が，Montroll と Ward (1958) によって導かれ，これら二つの方法の関係は，Bloch と De Dominicis (1959) によって論じられている．

3. 基底状態の摂動論との関係

基底状態エネルギーをきめるのに使われた摂動論の形と，この有限温度の摂動論とは，著しい類似点をもっているが，いくつかの重要な相異点ももっている．これら二つの展開を比較するために，摂動級数の第一項と第二項とを考えよう．これら二項に寄与するグラフのいくつかを，26図に示す．この外に，これらのグラフの中のバーテックスにおいて，線が出たり入ったりする点を入れ変えることによって作られる．別のグラフもある．5，6図でいえば，5 (a)図から作られる 5 (b)図，6 (a)図から作られる 6 (b)，(c)，(d)図のようなものである．26(c)図は，基底状態の摂動論では現われなかったグラフである．なぜなら，基底状態では，一つの準位が同時に空孔準位であったり，粒子準位であったりはできないからである．しかし，有限温度では $f_{k'}(1-f_{k'})$ が消えないので，このグラフからの寄与が残る．$\log \mathcal{Z}$ に対する 26(a)図のようなグラフからの寄与は，

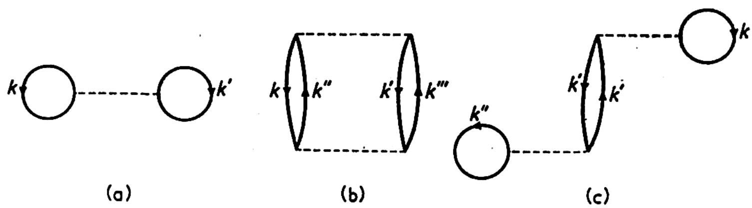
$$-\frac{1}{2}\beta\sum_{k}\sum_{k'} f_k f_{k'}(V_{kk',kk'}-V_{kk',k'k}), \qquad (7.11)$$

となる．26(b)図のようなグラフの寄与は，

$$\frac{1}{2}\sum_{k}\sum_{k'}\sum_{k''}\sum_{k'''}V_{kk',k'k'''}(V_{k''k''',kk'}-V_{k''k''',k'k})(1-f_k)(1-f_{k'})f_{k''}f_{k'''}$$
$$\times\int_0^{\beta}dt_2\int_0^{t_2}dt_1\exp[(\epsilon_k+\epsilon_{k'}-\epsilon_{k''}-\epsilon_{k'''})(t_1-t_2)]$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{k}\sum_{k'}\sum_{k''}\sum_{k'''}V_{kk',k''k'''}(V_{k''k''',kk'}-V_{k''k''',k'k})$$
$$\times\left[\beta\frac{(1-f_k)(1-f_{k'})f_{k''}f_{k'''}}{\epsilon_k+\epsilon_{k'}-\epsilon_{k''}-\epsilon_{k'''}}\right.$$
$$\left.+\frac{f_kf_{k'}(1-f_{k''})(1-f_{k'''})-(1-f_k)(1-f_{k'})f_{k''}f_{k'''}}{(\epsilon_k+\epsilon_{k'}-\epsilon_{k''}-\epsilon_{k'''})^2}\right]$$
$$=\frac{1}{2}\beta\sum_{k}\sum_{k'}\sum_{k''}\sum_{k'''}V_{kk',k''k'''}(V_{k''k''',kk'}-V_{k''k''',k'k})$$
$$\times\frac{(1-f_k)(1-f_{k'})f_{k''}f_{k'''}}{\epsilon_k+\epsilon_{k'}-\epsilon_{k''}-\epsilon_{k'''}}. \tag{7.12}$$

p. 124
である．これは (4.36) と構造が似ている．26(c)図のようなグラフの寄与は，次で与えられる．

$$\frac{1}{2}\beta^2\sum_{k}\sum_{k'}\sum_{k''}f_kf_{k'}(1-f_{k'})f_{k''}(V_{k',kk'}-V_{kk',k'k})$$
$$\times(V_{k'k'',k'k''}-V_{k'k'',k''k'}) \tag{7.13}$$



26図 有限温度の摂動論に現われる一次および二次のグラフの例。

基底状態の摂動論では，この項に対応するものがない．

Kohn と Lattinger (1960) によって，基底状態の摂動展開は，系の体積が有限ならば，温度を零に近づけることによって導かれることが示された．β が無限大になる極限で，(7.10)，(7.8) で与えられる伝播関数は，(4.28)，(4.29) で与えられる伝播関数になる．基底状態の理論では，パラメタ μ を

無摂動フェルミ・エネルギーに等しいとおかねばならない．そうすると，新しい理論における無摂動粒子数は，元の理論の粒子数に等しくなる．摂動による粒子数の変化は (6.3) から計算されるが，これは温度が零に近づくと零になる．それは μ が，因子 f_k の中にだけ現われ，その μ についての微係数は，指数関数的に零になるからである．$\log \mathcal{Z}$ に対する摂動級数で，消えないで残る項は，β に比例するものだけで，それらは先に導いたエネルギーの表式と，ぴったり一致する．

温度零の極限をとる前に，体積を無限大にすると，この事情は相当変ってくる．パラメタ μ は，もはや無摂動系のフェルミ・エネルギーに等しいとおくことはできず，それは化学ポテンシャルに等しくなければならない．有限温度の理論の，温度零の極限において，基底状態エネルギーに寄与するすべてのグラフは，基底状態理論において与えたのと同じ寄与を，

$$-\kappa T \log \mathcal{Z} = \overline{E} - \mu \overline{N} \tag{7.14}$$

に与える．しかし，この二つの計算は同等でない．なぜなら，基底状態理論では，粒子数が与えられていて，エネルギーを計算するのであるが，有限温度理論では，化学ポテンシャルが与えられていて，(7.14) が計算される．
p. 125
この差は，26(c)図のようなグラフから来ているはずで，これらのグラフは，有限温度理論だけ寄与し，基底状態理論では零になる．温度零の極限で，(7.13) は有限の極限値に近づく．それは，この極限で

$$\beta f_{k'}(1-f_{k'}) = \frac{1}{4}\beta \operatorname{sech}^2\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_{k'}-\mu)\right]$$

が，$\epsilon_{k'}-\mu$ の δ 関数のように振舞うからである．

これら二つの異る摂動論によって与えられる結果は，必ずしも一致しない．実際，この二つの展開級数が，エネルギーに対してちがった結果を与える反例が，Kohn と Luttinger (1960) によって与えられた．しかし，Luttinger と Ward (1960) が示したように，ある条件の下では，級数が一致することもある．この不一致をひきおこす原因が二つ考えられる．その一つは，無摂動系の基底状態は，真の基底状態と直交していて，したがって (4.31) か

らわかるように，第一の型の理論は，何か別の定常状態のエネルギーを与えているかもしれないということである．いずれにせよ，このことは，摂動論の結果を余り重大に考えてはいけないという警告になる．

基底状態の摂動論と，有限温度の摂動論との相異は，ハートリー・フォック理論の複雑さが増すことからも説明される．平面波の状態は，有限温度のハートリー・フォックの方程式を満たすけれども，これで問題が解決したのではなくて，準位の占有数に対して，つじつまを合わせる条件が余分に存在する．エネルギー ϵ_k の準位が占められる確率は，$\frac{1}{2}\left\{1-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_k-\mu)\right]\right\}$ であるから，つじつまの合ったエネルギーに対する方程式は，

$$\epsilon_k = T_k + \frac{1}{2}\sum (V_{kk',kk'} - V_{kk',k'k})\left\{1-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_{k'}-\mu)\right]\right\} \qquad (7.15)$$

で与えられる．T_k は準位のエネルギーである．これはかなり複雑な方程式で，絶対零度の極限においてさえ，普通のハートリー・フォックの方程式とちがっている．すなわち，平面波からつくったどの行列式も (3.7) を満たすのに反して，(7.15) は占められた準位がすべて，占められていない準位より低いエネルギーをもつべきことを，要請している．圧力に対するハートリー・フォックの表式は，26(a)図や26(c)図のようなグラフ，および多くのこみ入ったグラフをとり入れているのに反して，絶対零度のエネルギーに対するハートリー・フォックの表式は，5図のグラフだけを考慮している．

p. 126
4. 任意の演算子の期待値

有限温度の摂動論を使って，熱平衡にある系の任意の演算子の期待値を計算することができる．これを示すために，次の関係を使う．

$$\langle Q\rangle = \{\sum_n \exp[-\beta(E_n-\mu N_n)]Q_{nn}\}/\sum_n \exp[-\beta(E_n-\mu N_n)]$$

$$= \mathrm{Tr}\{Q\exp[-\beta(H-\mu N)]\}/\mathrm{Tr}\{\exp[-\beta(H-\mu N)]\}. \qquad (7.16)$$

さて，パラメタ γ の関数

$$\mathscr{Z}(\gamma) = \mathrm{Tr}\exp[-\beta(H-\mu N+\gamma Q)] \qquad (7.17)$$

を定義する．この関数は，$\gamma=0$ の時分配関数に等しい．また，$\gamma=0$ における導関数は Q の期待値を与える．すなわち，(7.17) と (7.16) から次の式が示される．

$$\left[\frac{\partial \log \mathcal{Z}(\gamma)}{\partial \gamma}\right]_{\gamma=0} = -\beta\langle Q\rangle \qquad (7.18)$$

関数 $Z(\gamma)$ は，丁度ハミルトニアン H を，$H+\gamma Q$ でおきかえた時に得られるはずの分配関数である．この分配関係の対数は，摂動 H_1 と同時に，余分の相互作用 γQ を考慮すれば，すべてのつながったグラフを加え合わせて計算されるはずである．しかし，$\log\ \mathcal{Z}(\gamma)$ を完全に知る必要はなくて，(7.18) によれば，その導関数の $\gamma=0$ における値を知れば充分である．これは相互作用 γQ を一度だけ含んだ，すべてのつながったグラフの和で与えられるはずである．一つの演算子の期待値を計算するこの規則は，基底状態の摂動論の場合と同じで，一粒子または二粒子演算子に対して現われるグラフは，8および9図に示されたようなグラフを含んでいる．

5.　摂動論の古典的極限

分配関数の展開は，古典力学よりも量子力学の場合の方が，はるかに難しい．古典力学では，運動エネルギーと位置エネルギーは分離していて，分配関数は，運動エネルギーだけから来る因子と，位置エネルギーだけから来る因子の，積の形に書ける．運動エネルギーを含む因子は直ちに求まり，近似が必要なのは，位置エネルギーの部分だけである．自由エネルギーに対する展開は，Mayer (1937) によって与えられ，同じ方法の簡単な導き方が，最近 Salpeter (1958) により与えられた．この方法は，密度のベキ級数の
p. 127
形で，圧力の“ビリアル展開”を与える．量子効果が重要でなければ，この古典的な展開の方が，この章の前の部分に述べた展開よりもずっと簡単である．量子補正は，Kahn と Uhlenbeck (1938) の方法で含ませることができ，それは分配関数を，$\hbar^2$ のベキ級数の形に与える．量子論から古典理論を導くことは，第一原理から導き出すほどには満足なやり方ではないが，

量子論の理解を深めるのには役立つ. 二つの展開の間の関係は, Bloch と De Dominicis (1959) によって簡単に論じられた。逆に量子論は, Kahn と Uhlenbeck が与えた展開を並べ変えても導くことができる. これは, Lee と Yang (1959) が用いた方法である.

プランクの定数 $\hbar$ を変数として扱い, 温度一定, 密度一定に保って $\hbar$ を 0 に近づけた時の極限値として, 展開の古典的極限を得ることができる. 無摂動系を考えると, 粒子密度は,

$$\overline{N}/\mathcal{V}=\mathcal{V}^{-1}\sum_k f_k$$

$$=\pi^{-2}\int_0^\infty\{\exp[\beta(\hbar^2k^2/2M-\mu)]+1\}^{-1}k^2dk \qquad (7.19)$$

となる. これは, $\exp(\mu\beta)$ が $\hbar^3$ に比例するように μ が変るとして, $\hbar$ を 0 に近づけると, 有限値に収束する. この極限で, 普通の Maxwell-Boltzmann の分布則が得られる. (7.10) によって定義される伝播関数は, $\beta\hbar^2k^2/2M$ が 1 の程度でない限り, $\hbar$ が小さい極限で k に無関係になる. フェルミ線の一つの閉じたループが寄与する因子は, バーテックスの座標に無関係であり, ループ中の各空孔線に対して $\exp(\mu\beta)$ のベキが寄与される. 各々の閉じたループ中には, 少くとも一本は空孔線がなければならない.

摂動論展開を, 運動量空間表示から, 座標空間表示に変換することができる. (7.10) で定義される伝播関数は, k に無関係であるから, 座標空間では δ-関数に比例する. 相互作用が局所的であれば, 閉じたループ上のすべての点は, 空間の同一点に対応しなければならない. 閉じたループを一周すると, 各線ごとに δ-関数が一つづつあり, 一個を除いて, これらすべての点にわたる積分は, $\delta(0)$ を与える. しかし, 伝播関数は, 運動量空間で $(2M\kappa T)^{1/2}/\hbar$ に比べて, はるかに小さい k の値に対してだけ一定であるから, 上に得られた $\delta(0)$ は, 何か $\hbar^3$ に比例する量でおきかえるべきものである. したがって, 各々の閉じたループの中に空孔線を一本だけ含むようなグラフから有限の寄与が得られる.

それゆえ, 量子論の閉じたループは, 古典論のクラスター展開の点に還元

され，閉じたループの数は，対応するクラスター積分の次数に等しい．古典論では，クラスター積分を得るのに，同数の点をもつすべての項について和をとる．そのような同数の閉じたループを含むすべてのグラフについての和は，唯二つだけ閉じたループがある最も簡単な場合でも，量子論を古典的極限に移さないと，容易に行えない．

第VIII章　有限温度におけるグリーン関数

1.　有限温度における励起状態

p. 129
第V章で系の励起状態を考えた時，ある特定の励起状態を記述することは，有限の系に対してだけ意味があり，無限に大きい系のエネルギー準位は，余りに数多くなってしまって，一つ一つそれらを区別して考えることができないことを見た．この傾向は，有限温度で平衡状態にある系の励起状態を研究するとき一そう強く，平衡状態そのものも，非常に多数のエネルギー準位の統計集団と見なされる．われわれが研究できると期待してよいのは，励起状態の中，最も数多い型のものの一般的な様相だけである．

系の巨視的励起を扱うことも，微視的励起を扱うこともできる．巨視的な励起としてはまず，外部条件を課して系全体を動かすことが可能である．たとえば，液体を入れた容器に一様な並進運動をさせることもできる．この種の巨視的な励起は，次の形の分配関数

$$\mathrm{Tr}\,[\exp(\alpha N-\beta H+\gamma P)]$$

を計算することによって理論的にとりあつかうことができる．ここで P は運動量演算子であり，γ は指定された平均の並進運動が得られるように選ぶのである．これは統計力学でいつも用いられる標準的手段である．

もう一つの型の巨視的な励起は，系の一つの部分が他の部分に相対的に励起される場合である．平均速度が系の中で場所によってちがっていたり，温度が場所々々で変化することなどが，その例である．一般にこの種の励起は，系が平衡状態でなくなるので，扱いが非常に難しい．場合によっては，巨視
p. 130
的な変数が非常にゆっくり変化するので，局所的な熱力学が近似的に成り立

ち，系が平衡にもどる過程は，粘性とか，熱伝導度のような，散逸過程を用いて記述できる．したがって，粘性係数とか，熱伝導度のような量を計算することが，有限温度における多粒子系の理論の重要な一面である．その様な散逸過程の理論は一般に，輸送理論として知られている．

われわれが扱おうとしているのは，別の型の励起で，それは平衡状態にある系に，粒子または空孔を，一つか二つ加えることによって得られる励起状態である．たとえば，平衡状態にある系を励起する最も簡単な方法の一つは，系にもともとある粒子をどれも乱さないで，粒子を一つ系につけ加えることである．その時，系はもはや平衡ではなくなるが，系は温度と密度とを殆んど変えずに，すぐ平衡にもどるであろう．多粒子系の基底状態の理論では，この種の励起を記述するのに，一粒子グリーン関数を定義したが，有限温度におけるこの種の励起を記述するのにも，同様にグリーン関数を定義することができる．

有限温度で使われる一粒子グリーン関数は，丁度 (5.1) で定義されたグリーン関数の平均である．エネルギー表示で書くと，それは次のようになる．

$$S_k(t_1-t_2)=\frac{\{\sum_n \exp[\beta(\mu N_n-E_n)]\langle\Psi_n|\mathrm{T}[a_k(t_2)\tilde{a}_k(t_1)]|\Psi_n\rangle\}}{\sum_n \exp[\beta(\mu N_n-E_n)]}$$
$$=\mathrm{Tr}\{\exp[\beta(\mu N-H)]\,\mathrm{T}[a_k(t_2)\tilde{a}_k(t_1)]\}/\mathrm{Tr}\exp[\beta(\mu N-H)]. \tag{8.1}$$

エネルギーは，化学ポテンシャルを原点にとって測るのが便利なので，時間に依存する演算子は，

$$a_k(t)=\exp[it(H-\mu N)]\,a_k\exp[-it(H-\mu N)]$$
$$\tilde{a}_k(t)=\exp[it(H-\mu N)]\,a^{\dagger}_k\exp[-it(H-\mu N)], \tag{8.2}$$

によって定義される．t は実数でも虚数でもよい．このように，時間に依存する形に書くと，グリーン関数は，系に一粒子を加えた後，または系から一粒子を取り除いた後で，系がどのように平衡状態にもどるかを測るものになる．グリーン関数のフーリエ変換は，(5.15) のような項の平均であり，一粒子をつけ加えること，または取除くことによってひきおこされた，エネル

ギー分布の変化は，このフーリエ変換の虚数部分によって与えられる．

有限温度におけるグリーン関数の性質と用途については，Bonch-Bruevich と Kogan (1960) が，彼等の以前の仕事に関連して議論しており，また Martin と Schwinger (1959) によって論じられている．

p. 131

2. 摂動論によるグリーン関数の計算

(8.1) で定義されたようなグリーン関数を計算する方法は，u_1，u_2 を，0 と β の間の実数として，$t_1=-iu_1, t_2=-iu_2$ とおいてみるとはっきりする．$u_2>u_1$ の場合を考えると，(8—1) より

$$S_k(-iu_1+iu_2)=\mathrm{Tr}\{\exp[(u_2-\beta)(H-\mu N)]\,a_k\exp[(u_1-u_2)(H-\mu N)]\,a^\dagger_k \times\exp[-u_1(H-\mu N)]\}/\mathrm{Tr}\exp[-\beta(H-\mu N)] \tag{8.3}$$

を得る．分子の指数関数は，(7.2) の展開と同様なやり方で，級数展開することができる．この時，積分の範囲は，$\exp[(u_2-\beta)(H-\mu N)]$ の展開に対しては，u_2 から β まで，$\exp[(u_1-u_2)(H-\mu N)]$ の展開に対しては，u_1 から u_2 まで，$\exp[-u_1(H-\mu N)]$ の展開に対しては，0 から u_1 までとる．そして，これら三つの展開の積に現われる各項の平均値を求めるのに，Wick の定理を応用できる．したがって，上の分数の分子は，0 と β の間にバーテックスをもち，また，準位 k を表わし，u_1 でグラフに入り，u_2 でグラフから出て行くような外線をもったグラフを，つながっているものも，つながっていないものも，全部集めた和によって与えられるはずである．分母の方は，外線をもたないすべてのグラフの和で与えられるので，グリーン関数は，一本の外線をもったすべてのつながったグラフの和で与えられる．したがって，有限温度におけるグリーン関数を計算するための規則は，基底状態のグリーン関数を計算するために与えられた規則と同じである．異っている点は，積分範囲が変ることと，無摂動系の伝播関数がちがうことである．

一粒子グリーン関数は，**結ばれた** (connected) 自己エネルギー部分を使って計算でき，(5.35) に似た式が得られる．しかし，二粒子グリーン関数

に対する式を導いた第V章9節の計算を，もう一度くり返してみるのももっと興味がある．この計算は一粒子グリーン関数の計算と似ている．

われわれが計算したいグリーン関数は，(5.61) で定義された問題に類似したもので，

$$G(k_2, k_1;\ k_3, k_4;\ -i(u_1-u_2))=$$
$$\langle \exp[-(u_1-u_2)(H-\mu N)]\,a^{\dagger}_{k1}a_{k2}\exp[(u_1-u_2)(H-\mu N)]\,a^{\dagger}_{k3}a_{k4}\rangle,\quad u_1<u_2 \text{ の時},$$
$$\langle \exp[(u_1-u_2)(H-\mu N)]\,a^{\dagger}_{k3}a_{k4}\exp[-(u_1-u_2)(H-\mu N)]\,a^{\dagger}_{k1}a_{k2}\rangle,\quad u_1>u_2 \text{ の時} \tag{8.4}$$

p. 132
である．この関数に対する積分方程式は次のように導ける．

$$\begin{aligned}G(k_2, k_1;\ k_3, k_4;\ -iu)&\\ =-S_{k1}(iu)S_{k2}(-iu)\delta_{k_1k_4}\delta_{k_2k_3}&+S_{k_1}(0)S_{k3}(0)\delta_{k_1k_2}\delta_{k_3k_4}\\ +\sum_{k_5}\sum_{k_6}\int_0^{\beta}\!\!\int_0^{\beta}&S_{k_1}(iu')S_{k_2}(-iu')\Gamma(k_2, k_1;\ k_5, k_6;\ -iu''+iu')\\ \times[G(k_5, k_6;\ k_3, k_4;\ -iu+iu'')&-S_{k_5}(0)S_{k_3}(0)\delta_{k_5kk_6}\delta_{3k_4}]\,du'du''.\end{aligned} \tag{8.5}$$

この式で，Γ はすべての既約なバーテックス部分の和で与えられる．既約バーテックス部分というのは，u' でグラフに入る外線と，u'' でグラフから出て行く外線を，それぞれ一本ずつ持つグラフの中で，同じ“時刻”において二本のフェルミ線を切っても，同様な二つのグラフに分解しないグラフを指す．この方程式に導く理論は，(5.66) へ導いた理論と全く同じである．この方程式は，式中の一粒子グリーン関数が，自由粒子に対するものと同じように振舞うと仮定すると解くことができる．——これは準粒子近似である．この仮定で積分方程式は次のようになる．

$$\begin{aligned}G(k_2, k_1;\ k_3, k_4;\ -iu)&-S_{k_1}(0)S_{k_3}(0)\delta_{k_1k_2}\delta_{k_3k_4}\\ =\frac{1}{4}\left\{1+\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_{k_1}-\mu)\right]\right\}&\left\{1-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_{k_2}-\mu)\right]\right\}\\ \times\{\delta_{k_1k_4}\delta_{k_2k_3}\exp[u(\epsilon_{k_2}-\epsilon_{k_1})]&-\sum_{k_5}\sum_{k_6}\int_0^{\beta}\!\!\int_0^{\beta}\exp[u'(\epsilon_{k_2}-\epsilon_{k_1})]\end{aligned}$$

$$\times\Gamma(k_2, k_1; k_5, k_6; -iu''+iu')[G(k_5, k_6; k_3, k_4; -iu+iu'') - S_{k_5}(0)S_{k_3}(0)\delta_{k_5k_6}\delta_{k_3k_4}]du'du''. \tag{8.6}$$

また，われわれは，関係式

$$G(k_2, k_1; k_3, k_4; iu)=G(k_2, k_1; k_3, k_4; -i\beta+iu) \tag{8.7}$$

を用いなければならない．この式は，(8.4) から直接出せる．この方程式は，フーリエ級数に展開することによって最も容易に解くことができる．すなわち

$$G(k_2, k_1; k_3, k_4; -iu)-S_{k_1}(0)S_{k_3}(0)\delta_{k_1k_2}\delta_{k_3k_4} = \sum_\nu G_\nu(k_2, k_1; k_3, k_4)\exp(2\pi i\nu u/\beta),$$

$$\Gamma(k_2, k_1; k_3, k_4; -iu)=\sum_\nu \Gamma_\nu(k_2, k_1; k_3, k_4)\exp(2\pi i\nu u/\beta) \tag{8.8}$$

のように展開すると，ν についての和はすべての整数値にわたり，(8.6) の解は，

$$G_\nu(k_2, k_1; k_3, k_4)=\frac{1}{2\beta}\left\{\frac{\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_{k_2}-\mu)\right]-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_{k_1}-\mu)\right]}{\epsilon_{k_2}-\epsilon_{k_1}-2\pi i\nu/\beta}\right\} \times\{\delta_{k_1k_4}\delta_{k_2k_3}-\beta\sum_{k_5}\sum_{k_6}\Gamma_\nu(k_2, k_1; k_5, k_6)G_\nu(k_5, k_6; k_3, k_4)\} \tag{8.9}$$

となる．

p. 133

3. プラズマ振動

第V章では，あるポテンシャルによって相互作用するフェルミ粒子系のグリーン関数に対する方程式を議論した．そこで見出したことは，運動量変化が零の極限で，ポテンシャルの行列成分が有限の極限値をもつ時には，グリーン関数は，“零音波”として知られている励起を記述するということであった．この方法を，金属またはプラズマ中の電子に応用しようとすると，電子が電荷をもち，クーロン・ポテンシャルを通して相互作用しているという事実のために，事情は大変ちがってくる．$\mathcal{V}$ を系の体積，$\hbar q$ を二つの相互作用している電子のうちの，一方の電子が，初期状態と終状態でもつ運動

量の差とすると，クーロンポテンシャルの行列要素は，$4\pi e^2/\mathcal{V}q^2$ で与えられる．この q が 0 の時特異点をもつポテンシャルの影響をこの節で調べてみよう．

この特異点の主な効果を教えてくれるものとして，(5.10) で与えられるバーテックス部分の一次の摂動理論を用いよう．すなわち，

$$\Gamma_\nu(k+q,k;k'+q,k')=4\pi e^2/\mathcal{V}q^2-4\pi e^2/\mathcal{V}(k-k')^2 \tag{8.10}$$

をとる．運動量変化の値が小さい時の，方程式 (8.9) の解を考えることにして，(8.10) で交換効果の項を無視する．すると，方程式 (8.9) は次のようになる．

$$G_\nu(k+q,k;k'+q,k')=\frac{1}{2\beta}\left\{\frac{\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_{k+q}-\mu)\right]-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_k-\mu)\right]}{\epsilon_{k+q}-\epsilon_k-2\pi i\nu/\beta}\right\}$$
$$\times\left\{\delta_{kk'}-\frac{4\pi e^2\beta}{\mathcal{V}q^2}\sum_{k''}G_\nu(k''+q,k'';k'+q,k')\right\}. \tag{8.11}$$

この方程式を，k のすべての値について加えると，和に対する唯一つの方程式になり解くことができる．その結果は，

$$\sum_k\sum_{k'}G_\nu(k+q,k;k'+q,k')=X(q,\nu)/[1+(4\pi e^2\beta/\mathcal{V}q^2)X(q,\nu)], \tag{8.12}$$

である．ただし，$X(q,\nu)$ は次で与えられる．

$$X(q,\nu)=\frac{1}{2\beta}\sum_k\left\{\frac{\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_{k+q}-\mu)\right]-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_k-\mu)\right]}{\epsilon_{k+q}-\epsilon_k-2\pi i\nu/\beta}\right\}$$
$$=\frac{1}{2\beta}\sum_k\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_k-\mu)\right]\left\{\frac{1}{\epsilon_k-\epsilon_{k-q}-2\pi i\nu/\beta}-\frac{1}{\epsilon_{k+q}-\epsilon_k-2\pi i\nu/\beta}\right\}. \tag{8.13}$$

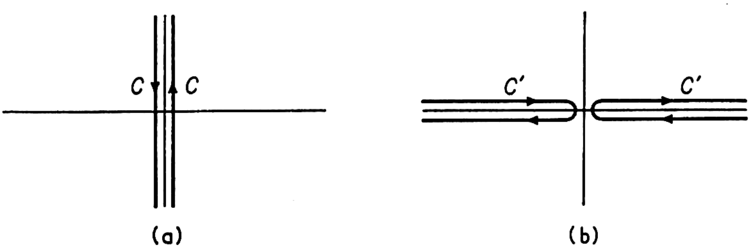
p. 134
(8.8)，(8.12) および (8.13) が，時間変数の虚数値に対するグリーン関数をきめるが，われわれの興味があるのは，この変数の実数値に対する関数の振舞いである．いま複素関数 $f(q,z)$ を，

$$f(q,z)=X(q,\beta z/2\pi i)/[1+(4\pi e^2\beta/\mathcal{V}q^2)X(q,\beta z/2\pi i)],$$

$$X(q,\ \beta z/2\pi i)=\frac{1}{2\beta}\sum_k\left\{\frac{\tanh\Bigl[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_{k+q}-\mu)-\tanh\Bigl[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_k-\mu)\Bigr]}{\epsilon_{k+q}-\epsilon_k-z}\right\} \tag{8.14}$$

で定義すると，$0<u<\beta$ に対して，グリーン関数は次のように書ける．

$$\begin{aligned}&\sum_k\sum_{k'}G(k+q,\ k;\ k'+q,\ k';\ -i'u)\\&=(2\pi i)^{-1}\beta\int_C f(q,\ z)\exp(uz)\,[\exp(\beta z)-1]^{-1}dz\\&=(2\pi i)^{-1}\beta\int_{C'} f(q,\ z)\exp(uz)\,[\exp(\beta z)-1]^{-1}dz\end{aligned} \tag{8.15}$$



27図　方程式 (8.15) で使われた二つの積分経路

ここで積分路 C, C' は，27図に示したようなものである．積分路 C は，虚数軸を囲み，積分路 C' は原点を除く実軸のすべてを囲む．$[\exp(\beta z)-1]^{-1}$ の特異点は，虚数軸上 $z=2\pi i\nu/\beta$（ν は任意の整数）に位置する極である．$f(q,z)$ のすべての特異点は，実軸上にあるものと仮定する．もし $f(z)$ の特異点がほかにあれば，われわれの近似は，矛盾に陥ることが証明される．時間の順序づけの過程の定義によって，時間変数の実の正値に対するグリーン関数は，負の虚数値に対する関数の解析接続であるから，それを u の代
p. 135
りに it でおきかえれば求められる．t の負の値に対しては，(8.7) と (8.15) とを用いて，解析接続できる．その結果は次のようになる．

$$\sum_k\sum_{k'}G(k+q,\ k;\ k'+q,\ k';\ t)$$

$$=\begin{cases}(\beta/2\pi i)\int_{C'}f(q,z)\exp(izt)\,[1-\exp(-\beta z)]^{-1}dz\,, & t<0 \text{ の時,}\\ (\beta/2\pi i)\int_{C'}f(q,z)\exp(izt)\,[\exp(\beta z)-1]^{-1}dz\,, & t>0 \text{ の時.}\end{cases}\tag{8.16}$$

関数 $f(q,z)$ の極は，粒子，または空孔を一つ作り出すことにより，励起される状態の，励起エネルギーを与える．このことは，(8.4) のフーリ変換を，エネルギー表示で書いてみればわかる．すなわち，(5.63) に類似した表式が得られるのである．この関数の極に対する方程式は，(8.14) から

$$1+\frac{2\pi e^2}{\mathcal{C}\mathcal{V}q^2}\sum_k\frac{\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_{k+q}-\mu)\right]-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_k-\mu)\right]}{\epsilon_{k+q}-\epsilon_k-z}=0\tag{8.17}$$

と求められるが，これは，方程式 (5.78) に似ている．(5.78) と同様に，この方程式の根の殆んどすべては，$\epsilon_{k+q}-\epsilon_k$ の可能な値の範囲にあるが，この範囲外にあるものが二根だけあり，一つは正，一つは負である．この二根に対応する励起状態は，**プラズマ・モード**として知られ，波数 q のプラズマ振動の振動数を，$\omega_p(q)$ とすると，二根は $\pm\hbar\omega_p(q)$ である．プラズマ振動数は，(8.17) の k についての和を，積分でおきかえれば求められる．

この方程式は，種々の特別な場合について研究されている．古典的極限（μ が負の大きい値になる）は，Bohm と Gross (1949) により，また絶対零度の極限は Bohm と Pines (1953), Pines (1953), Sawada 達 (1957) によって調べられた．一般式は，Montroll と Ward (1958) により導かれた．この方程式の最も重要な特徴は，q を 0 に近づけた時，解が有限な極限値をもつことである．有効質量近似が妥当であるとすると，興味のある運動量の範囲で，

$$\epsilon_k=\text{const.}+\frac{\hbar^2k^2}{2M^*}\tag{8.18}$$

p. 136
とおくことができ，(8.17) は次のようになる

$$0=1+(2\pi e^2/\mathcal{C}\mathcal{V}q^2)\sum_k\left\{1-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_k-\mu)\right]\right\}$$

$$\times\{[\hbar^2(2\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}+q^2)/2M^*-z]^{-1}-[\hbar^2[2\mathbf{k}\cdot\mathbf{q}-q^2]/2M^*-z]^{-1}\}$$
$$=1+\frac{2\pi e^2}{CVq^2}\sum_k\left\{1-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_k-\mu)\right]\right\}$$
$$\times\ \frac{M^*}{2\hbar^2kq}\log\frac{z^2-\hbar^4(2kq+q^2)^2/4M^{*2}}{z^2-\hbar^4(2kq-q^2)^2/4M^{*2}} \tag{8.19}$$

この式を導く際，$\mathbf{k}$ のすべての方向について平均した．小さい q に対する分散関係を得るには，この式を q のべき級数に展開する．そのとき，$\frac{1}{2}\left\{1-\tanh\left[\frac{1}{2}\beta(\epsilon_k-\mu)\right]\right\}$ が，準位 k の占められる確率であることを用いると

$$\omega_p^2(q)=\frac{4\pi e^2n}{M^*}+\hbar^2\langle k^2\rangle q^2/M^{*2} \tag{8.20}$$

が得られる．$\langle k^2\rangle$ は，無摂動系の分布に関する k^2 の平均値，また n は，電子の密度である．この式は，Bonch-Bruevich と Kogan (1959) によってこの形に導かれた．

(8.20) からわかるように，プラズマ振動は，波数が 0 に近づくと消えるような群速度をもち，したがって長波長のプラズマ振動は，高い振動数をもつが，殆んど定常的である．長波長の極限では，プラズマ振動の正確な古典的記述が可能である．電子の速さが余り大きくなくて，振動の周期の間に動く距離が，波長に比べて非常に短かければ，プラズマを連続体のように扱うことができる．

プラズマ振動の古典的理論は，Langmuir と Tonks (1929) によるものである．ポアソン方程式は，$\mathcal{E}$ を電場，δn を一点における負電荷と正電荷の差とすると，

$$\operatorname{div}\mathcal{E}=-4\pi e\delta n \tag{8.21}$$

となる．連続の方程式は次で与えられる．

$$\frac{\partial n}{\partial t}+\operatorname{div}\mathbf{j}=0\,. \tag{8.22}$$

ここで電流密度は

$$\mathbf{j}=n\mathbf{v}=(n_0+\delta n)\mathbf{v} \tag{8.23}$$

である．一方電子の運動方程式は，M を電子の質量として，

$$M\left[\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t}+(\mathbf{v}\cdot\mathrm{grad})\mathbf{v}\right]=-e\mathcal{E} \tag{8.24}$$

p. 137
と書ける．$\mathbf{v}$ と δn を一次の程度の量とみなし，二次以下の項をすべて無視することにすると，(8.24) を (8.21) に代入して，

$$M\,\mathrm{div}(\partial\mathbf{v}/\partial t)=4\pi e^2\delta n \tag{8.25}$$

が得られる．(8.23) を (8.22) に入れ，時間で微分すると，

$$\frac{\partial^2(\delta n)}{\partial t^2}+n_0\,\mathrm{div}\left(\frac{\partial\mathbf{v}}{\partial t}\right)=0 \tag{8.26}$$

となり，(8.26) と (8.25) とを組み合わせると，次の関係式が導かれる

$$\frac{\partial^2(\delta n)}{\partial t^2}+\frac{4\pi e^2 n_0}{M}\delta n=0 \tag{8.27}$$

この方程式は，電子密度がその平衡分布の周りに，振動数

$$\omega_p=\sqrt{4\pi e^2 n/M} \tag{8.28}$$

で振動することを示している．したがって，プラズマ振動は，無限大の位相速度と，0の群速度をもつ波である．

4. 相関エネルギー

絶対零度における電子気体のエネルギーや，有限温度における圧力を，摂動論を使って直接計算することは，級数のある項が無限大になるので，実行不可能である．絶対零度における事情を考えてみると，展開の低次のグラフは，5図および6図に示したようなものである．5(a)図は，電子間の直接のクーロン相互作用を表わし，無限大のエネルギーを与えるが，この項は，電子の電荷を中和する正の電荷の一様な分布と，電子との相互作用によって丁度打消されるはずである．金属やプラズマ中の正の電荷は，一様に分布してはいないが，このことによる補正を計算することは，そんなに困難ではない．5(b)図は，縮退した系の交換エネルギーを表わす．そのようなグラフの寄与は，相互作用している二つの粒子の運動量の差に逆比例するから，単

位体積当りの交換エネルギーは，n を電子密度として，$e^2n^{4/3}$ に比例する．
p. 138
e^4 に比例する項が6図に示されたグラフで与えられることは，クーロンポテンシャルを（4.36）式の右辺に入れて見ると，

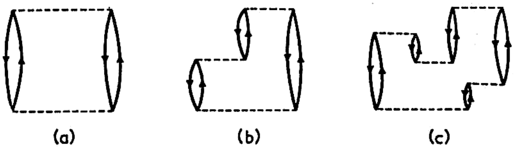
$$W_2=\frac{1}{2\mathcal{V}^2}\sum_q\left\{\sum_{\substack{l<k_F\\|l+q|>k_F}}\sum_{\substack{l'<k_F\\|l'-q|>k_F}}\frac{2M^*/\hbar^2}{l^2+l'^2-(\mathbf{l}+\mathbf{q})^2-(\boldsymbol{l}'-\mathbf{q})^2}\right.$$
$$\left.\times\frac{4\pi e^2}{q^2}\left[\frac{4\pi e^2}{q^2}-\frac{4\pi e^2}{(\mathbf{l}-\boldsymbol{l}'+\mathbf{q})^2}\right]\right\} \tag{8.29}$$

が得られることからわかる．運動量変化 $\hbar q$ が 0 に近づくと，条件 $l<k_F$，$|\mathbf{l}+\boldsymbol{q}|>k_F$ を満たす l の値の数は，q に比例して0に近づき，l' に対す同様の条件を満たす l' の値の数も，同じく 0 に近づく．したがって，小さい q に対して，上式の｛　｝の中の式は，q^{-3} に比例し，その結果，和は対数的に発散する．

電子気体の実際のエネルギーから，運動エネルギーおよび交換エネルギーの和を引いたものは，**相関エネルギー**（Correlation energy）として知られている．相関エネルギーは必ず負の量である．なぜならば，運動エネルギーと，交換エネルギーを合わせたものは，平面波で作られた行列式に関する，ハミルトニアンの期待値にほかならず，真のエネルギーはつねにこの値より低いはずだからである．この相関エネルギーの大きさを見つもる最初の試みは，Wigner（1934）によってなされた．彼は，反対のスピンをもつ粒子間の相関をとり入れるような試行波動関数を使って，相関エネルギーを見つもった．Wigner の方法は，本質的に高密度に対する方法であるが，低密度では，安定な配置として電子は格子を作ることは明らかである．そのような格子を作った電子のエネルギーは計算でき，高密度と低密度の両端の結果を内挿することは可能である．

これに似た問題は，有限温度で圧力を計算しようとするときにおこり，このときも，摂動級数の中に無限大の項を含む．問題を少し一般的に考えよう．相関エネルギーを計算するのに，摂動論を使うというアイディアは，Gellmann と Brueckner（1957）によって提案された．彼らは，摂動展開の

各次数で，最もはげしく発散するグラフは，28図に示したようなものである
p. 139
ことを見出した．これらのグラフは，運動量変化 **q** を一定に保って形式的に集めることができるが，そうすると小さい **q** に対して，展開の各項は積分できないのに，和を作ると積分可能な式が得られる．Montroll と Ward (1958) は，28図に示したようなグラフが，高密度低温度に対しても，高温度低密度に対しても，いちばん重要なものであることを示した．これらのグラフが，高密度低温度で Gellmann と Brueckner の結果を与え，低密度



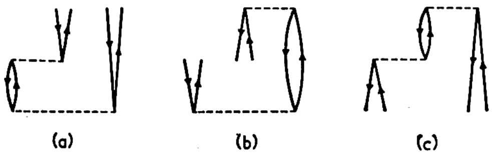
28図　クーロン相互作用に対して最も強く発散する摂動論の二次，三次および五次のグラフ．

高温度では，電解質溶液中の相関効果をとり扱うために発展させられた，Debye と Hückel (1923) の理論へ導くのである．摂動論は，低密度，低温度で正しい結果を与え得ないことは明らかである．なぜなら，この時作られる格子のエネルギー密度は，次元解析からもわかるように，$e^2n^{4/3}$ に比例しなければならないからである．摂動論の各項の中で，この形の式を与えることができる唯一の項は，交換エネルギーであるが，これは反対符号を与えてしまう．

Kinoshita と Nanbu (1954) により提案された方法を使うと，28図に示されたグラフの和を，グリーン関数で表わすことができる．もしグラフの一つを，一本の相互作用線を取り除くことによって切り開くと，グリーン関数に寄与するグラフが得られる．たとえば，29(b)図を切開くのに，三つの異なる場所で切ることができ，その結果28図に示すような．三種のちがったグラフが得られる．実際，グリーン関数と圧力との間には，一般的な関係があり，それを利用することができる．ポテンシャルが，ある結合常数 g に比例するとすれば，$\log \mathcal{Z}$ を g について微分したものは，(6.5) と (6.6)

から明らかなように，ポテンシャル・エネルギーの期待値の $-\beta$ 倍になっている．ポテンシャル・エネルギーの期待値は，(8.4) により

$$\langle V\rangle=-\kappa Tg\frac{d\log\mathcal{Z}(g)}{dg}$$
$$=\frac{1}{2}\lim_{u\to+0}\sum_{k_1}\sum_{k_2}\sum_{k_3}\sum_{k_4}V_{k_1k_3,\,k_2k_4}$$
$$\times[G(k_2,k_1;\,k_3,k_4;\,-iu)-\delta_{k_1k_4}\delta_{k_2k_3}S^{(0)}_{k_2}] \qquad (8.30)$$



29図 28(b)図から相互作用を一本取除いて得られるグラフ

である．ここでグリーン関数を，結合常数 g の関数と見なす．log $\mathcal{Z}$ の実
p. 140
際の値を得るには，この式を積分しなければならない．いまの問題では，結合常数は e^2 であり，もしポテンシャルの直接相互作用の部分だけをとると，(8.12) を用いて (8.30) を計算することができる．一粒子グリーン関数 S を含む項は，log $\mathcal{Z}$ で一次の項に寄与するだけであるので，そのような項を無視したとしても，その誤差は，log $\mathcal{Z}$ に現われるよく知られた一次の項を用いて，あとから補正することができる．したがって，これらの項を無視することにすれば，u を上から 0 に近づけようと，下から 0 に近づけようと，問題でなくなり，次の結果が得られる．

$$-\kappa T\frac{d\log\mathcal{Z}(e^2)}{de^2}=\frac{1}{2}\lim_{u\to0}\sum_{q\neq0}\sum_{k}\sum_{k'}\frac{4\pi}{\mathcal{V}q^2}G(k+q,k;\,k'+q,k';\,-iu)$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{\nu}\sum_{q\neq0}\frac{4\pi}{\mathcal{V}q^2}\frac{X(q,\nu)}{1+(4\pi e^2\beta/\mathcal{V}q^2)X(q,\nu)} \qquad (8.31)$$

これは直ちに積分できて，

$$\log(\mathcal{Z}/\mathcal{Z}_0)=-\frac{1}{2}\sum_{\nu}\sum_{q\neq0}\log[1+(4\pi e^2/\mathcal{V}q^2)X(q,\nu)] \qquad (8.32)$$

となる．これは，一次の項，すなわち，交換エネルギーを正しく与えないが，

この式と，それを e^2 のベキに展開したときの一次の項との差は，28図に示したようなグラフの和を与える．この近似で，電子間の相関の $-p\mathcal{V}$ への寄与は，

$$-(p\mathcal{V})_{\text{相関}}=\frac{1}{2}\kappa T\sum_{\nu}\sum_{q\neq 0}\left\{\log\left[1+\frac{4\pi e^2}{\kappa T\mathcal{V}q^2}X(q,\nu)\right]-\frac{4\pi e^2}{\kappa T\mathcal{V}q^2}X(q,\nu)\right\} \tag{8.33}$$

となり，この式は絶対零度の極限で，相関エネルギーの式に等しくなる．

この式の評価のしかたは，物理的な条件に関係する．非常な高温では，β が小さく，したがって (8.13) から明らかなように，$\nu=0$ の項が最も重要な項である．よって，q が k の平均値よりずっと小さければ，(8.13) から

$$X(q,0)=\frac{M^*\kappa T}{\hbar^2 q}\sum_{k}\frac{f_k}{k}\log\left|\frac{2k+q}{2k-q}\right| \approx M^*\kappa T\sum_{k}f_k(\hbar k)^{-2} \tag{8.34}$$

を得る．この式は，Maxwell-Boltzmann の分布では粒子の総数に等しく，Fermi-Dirac 分布ならば，粒子数の $3M^*\kappa T/\hbar^2k_F^2$ 倍に等しい．この近似がよいための条件は，

$$\frac{l^2\hbar^2 n}{M^*(\kappa T)^2}\ll 1 \tag{8.35}$$

p. 141

である．あるいは，別の言葉で言えば，$e^2n^{1/3}$ の形で変わる粒子あたりのポテンシャル・エネルギーと，$\hbar^2n^{2/3}/M^*$ に比例する零点エネルギーの積が，熱エネルギーの二乗よりもずっと小さくなければならないということである．これは明らかに充分条件でない．というのは，ポテンシャル・エネルギーが熱エネルギーよりも大きいと，零点エネルギーがどんなに小さくても，格子の形成されることがわかっているからである．零点エネルギーよりも小さい κT をもった，縮退したフェルミ気体に対して，条件 (8.35) がみたされることは可能であるが，それは非常に高密度——金属中の電子密度より遙

かに高い密度——で，はじめておこり得ることである．Maxwell-Boltzmann 分布に対して，(8.34) からきまる $X(q,0)$ の値 $X(q,0)=n\mathcal{C}\mathcal{V}$ を，(8.33) に入れると，圧力に対する補正として，

$$-p_{\text{相関}}=(\kappa T/4\pi)\int_0^\infty\{\log(1+4\pi e^2\beta n/q^2)-4\pi e^2\beta n/q^2\}q^2dq$$

$$=-\frac{2}{3}\sqrt{\pi}\,e^3n^{3/2}(\kappa T)^{-1/2} \tag{8.36}$$

が得られる．これは圧力に対する Debye-Hückel の補正で，高温でよいはずである．非常に高密度，高温度で，系が縮退していても，不等式 (8—35) が成り立つようなとき，圧力に対する補正は，交換効果と相関効果の和に等しく，したがって，

$$-p_{\text{交換}}-p_{\text{相関}}=-\frac{3e^2nk_F}{4\pi}-\frac{2}{\pi\sqrt{3\pi}}\frac{e^2n^{1/2}(\kappa T)M^{*3/2}}{\hbar^3} \tag{8.37}$$

となる．(8.35) によれば，交換効果による補正は，相関効果による補正よりずっと重要である．これらの諸式で，n は無摂動系の粒子密度を表わすことを忘れてはならない．エネルギー，密度，比熱に対する補正を計算するには，n を温度と，化学ポテンシャルの関数として表わす必要がある．

非常に低温では，ν が変化しても $X(q,\nu)$ ははげしく変化せず，したがって，ν についての和をとらねばならない．小さい q に対して，$X(q,\nu)$ の値は (8.13) より，

$$X(q,\nu)=\frac{M^*}{2\hbar^2\beta q}\sum_k\frac{f_k}{k}\log\frac{\hbar^4(2kq+q^2)^2/4M^{*2}+4\pi^2\nu^2/\beta^2}{\hbar^4(2kq-q^2)^2/4M^{*2}+4\pi^2\nu^2/\beta^2}$$

$$\approx\frac{\hbar^2q^2}{\beta M^*}\sum_k f_k\Big/\left(\frac{\hbar^4k^2q^2}{M^{*2}}+\frac{4\pi^2\nu^2}{\beta^2}\right)$$

$$=\frac{M^*n\mathcal{C}\mathcal{V}}{3\beta\hbar^2k_F^2}\left(1-\frac{2\pi\nu M^*}{\beta\hbar^2k_Fq}\tan^{-1}\frac{\beta\hbar^2k_Fq}{2\pi\nu M^*}\right) \tag{8.38}$$

p. 142
となる 小さい q に対してこの式を (8.33) に代入し，ν についての和を積分でおきかえる．このおきかえを，q のあらゆる値について行ったとすれば，積分は発散するので，α をある小さい値として，αk_F より小さい q の

値に対してこのおきかえを行い，αk_F より大きい q の値に対しては，ベキ級数展開を行う．このようにして

$$-p_{\text{相関}} \approx \frac{1}{4\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_0^{\alpha k_F} q^2 dq \Big\{ \log\Big[1+\frac{4\pi e^2 M^* n}{3\hbar^2 k_F^2 q^2} \times\Big(1-\frac{2\pi x M^*}{\hbar^2 k_F q}\tan^{-1}\frac{\hbar^2 k_F q}{2\pi x M^*}\Big)\Big] - \frac{4\pi e^2 M^* n}{3\hbar^2 k_F^2 q^2}\Big(1-\frac{2\pi x M^*}{\hbar^2 k_F q}\tan^{-1}\frac{\hbar^2 k_F q}{2\pi x M^*}\Big)\Big\} - \frac{1}{8\pi^2}\int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{\alpha k_F}^{\infty} q^2 dq \Big[\frac{4\pi e^2 \beta}{CVq^2} X(q, \beta x)\Big]^2 \tag{8.38}$$

が求まる．これは，化学ポテンシャルの関数と見なせば，圧力に対する式であり，密度の関数とみなせば，相関エネルギーに対する式になっている．(8.38) から大きい q に対し $X(q, \beta x)$ は

$$q^2/(\hbar^4 q^4/4M^{*2}+4\pi^2 x^2)$$

に比例することがわかるから，上式の二つの積分のうち，二番目のものは有限であり，それは圧力に対し $e^4 M^* n/\hbar^2$ に比例する項を寄与する．最初の積分の，被積分関数は大きい q に対して q^{-1} に比例し，積分は k_F が大きいとき，

$$(e^4 M^* n \hbar^2)\log(e^2 M^*/\hbar^2 k_F)$$

に比例する．このほかに，$e^4 M^* n/\hbar^2$ に比例した項で，6(c)図や，6(d)図に示された交換効果の項から来るものがある．これらの項の係数は，Gell-mann と Brueckner (1957) によって計算された．しかし，Ferrell (1958) は，上の近似が実際の金属の密度に対しては適当でないことを，次のような論拠に立って指摘した．すなわち，一般に，エネルギーを e^2 について二度微分したものは，負でなければならないという定理がある．ところが，Gellmann と Brueckner によって得られた式の二次の微係数は，符号が反対で，したがってその理論は，実際の金属中の電子密度より大きい密度に対してだけ適用できるのである．Ferrel の批判は，もとの式 (8.33) にはあてはまらない．というのは，この式の e^2 についての二次の微係数は，たし

かに負に相異ないからである．電子気体の高密度展開の他の項については，Du Bois (1959) がさらに詳しく調べている．高密度の電子気体の，低温比熱に対するこれらの項からの寄与は，Gell-Mann (1957) が計算している，

p. 143
(8.33) を，複素積分の形に書き改めておくと役に立つ．

$$-(p\mathcal{V})_{相関}=\frac{1}{4\pi i}\lim_{u\to+0}\sum_q\int_C\left\{\log\left[1+\frac{4\pi e^2\beta}{\mathcal{V}q^2}X(q,\beta z/2\pi i)\right]\right.$$
$$\left.-\frac{4\pi e^2\beta}{\mathcal{V}q^2}X(q,\beta z/2\pi i)\right\}e^{uz}(e^{\beta z}-1)^{-1}dz$$
$$=\frac{1}{4\pi i}\sum_q\int_{C'}\left\{\log\left[1+\frac{4\pi e^2\beta}{\mathcal{V}q^2}X(q,\beta z/2\pi i)\right]\right.$$
$$\left.-\frac{4\pi e^2\beta}{\mathcal{V}q^2}X(q,\beta z/2\pi i)\right\}(e^{\beta z}-1)^{-1}dz \tag{8.40}$$

ここで，C と C' は27図に示したような積分路である．(8.14) で定義された X が，z の偶関数であるという事実を使うと，この積分を，正の実軸だけを囲む経路 C'' をまわる積分に書き変えることができる．(8.40) を部分積分すると，

$$-(p\mathcal{V})_{相関}=\frac{1}{4\pi i}\sum_q\int_{C''}\left\{\left(\frac{4\pi e^2\beta}{\mathcal{V}q^2}\right)^2X(q,\beta z/2\pi i)\frac{\partial X(q,\beta z/2\pi i)}{\partial z}\right.$$
$$\left.\times\left[1+\frac{4\pi e^2\beta}{\mathcal{V}q^2}X(q,\beta z/2\pi i)\right]^{-1}\right\}\{-z+2\beta^{-1}\log(e^{\beta z}-1)\}dz\,. \tag{8.41}$$

この方程式の右辺の最初の { } の中の表式は，方程式 (8.17) の各根のところで，留数 -1 の一次の極をもち，X の各々の極のところに，留数 $+1$ の二次の極をもっている．二つ目の { } の中の表式は，正の実軸上で正則であるから，積分は次のような項の和になる．

$$\pm\left\{\frac{1}{4}z_0-\beta^{-1}\log(e^{\beta z_0}-1)\right\}=\pm\left\{-\beta^{-1}\log\left[2\sinh\left(\frac{1}{2}\beta z_0\right)\right]\right\} \tag{8.42}$$

ここで，z_0 が (8.17) の根であれば $+$ の符号をとり，z_0 が X の極であれば，$-$ の符号をとる．(8.14) からわかるように，$X(q,\beta z/2\pi i)$ の極

は，$\epsilon_{k+q}-\epsilon_k$ の可能な値の各々に対して現われ，これらの極は結合していない粒子-空孔対の励起エネルギーを与える．(8.17) の根はグリーン関数の極であるから，それらは結合した粒子—空孔対の励起エネルギーを与える．(8.42) を (6.11a) と比べると，この式が丁度，エネルギー z_0 をもつボーズ・モードの圧力に対する寄与になっていることがわかる．そしてこれは，温度を零に近づけると，零点エネルギーに等しくなる．したがって，相関効果にもとづく圧力への補正に対する式は，結合したボーズ粒子的な対励起と，
p. 144
結合しない対励起からの，圧力への寄与の差に等しくなっている，以上のような線に沿った，電子気体の相関エネルギーの議論は，Sawada (1957)，Brout (1957)，Sawada その他 (1957) の論文にみられる．

5. 遮蔽効果

遮蔽効果は，プラスズマ振動の理論，および相関エネルギーの理論と，非常に密接に関連した第三の現象である．媒質中におかれた一個の電荷による静電場の遮蔽効果は，摂動論を用いて計算することができる．そのために，まず媒質中の二点 $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ に電荷 e_1 と e_2 をおき，温度と化学ポテンシャルを一定に保った時，熱力学ポテンシャルがどのように変るかを計算する．このポテンシャルを，$\mathbf{r}_1$ または $\mathbf{r}_2$ で微分した導関数は，粒子に働く力を与え，したがって，静電場が求まることになる．媒質は電気的に中性であるから，e_1 または e_2 について一次の項は存在しない．e_1^2 および e_2^2 に比例する項は存在してもよいが，媒質が均一の場合には，これらの項は $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{r}_2$ によらないはずで，したがって電荷の自己エネルギーに寄与することになる．われわれが興味をもつのは，e_1e_2 に比例する項である．

媒質を無摂動系とみなすと，摂動ハミルトニアンは

$$H_1=-\int e\rho(\mathbf{r})\left(\frac{e_1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1|}+\frac{e_2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2|}\right)d^3\mathbf{r} \tag{8.43}$$

と書ける．ここで，$\rho(\mathbf{r})$ は，媒質中の電子に対する密度演算子である．電荷同志の間の相互作用や，一様にぬりつぶした正の電荷分布と，点電荷との

相互作用は，この摂動には含まれていない．この式を，(7.2) および (7.6) に入れると，熱力学ポテンシャルの変化が次の形に求められる．

$$-\delta p\mathcal{V}=\frac{e_1e_2}{|r_1-r_2|}-\frac{1}{2}\int d^3\mathbf{r}\int d^3\mathbf{r}'\int_0^\beta du\frac{e^2e_1e_2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1||\mathbf{r}'-\mathbf{r}_2|}$$
$$\times(\langle\rho(\mathbf{r},-iu)\rho(\mathbf{r}',0)\rangle+\langle\rho(\mathbf{r}',-iu)\rho(\mathbf{r},0)\rangle) \tag{8.44}$$

右辺の第一項は，点電荷同志の間の，直接相互作用からきているもので，第二項は，点電荷と媒質との相互作用に由来し，e_1e_2 に比例する．密度演算子は，

$$\rho(\mathbf{r})=\sum_k\sum_q a^\dagger_k a_{k+q}\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}) \tag{8.45}$$

と書くことができ，時間に依存する密度演算子の積の期待値は，(8.4) で定義されたグリーン関数によって与えられる．p. 145 u について，0 から β まで積分するので，フーリェ展開 (8.8) の中で，$\nu=0$ の成分だけが残り，熱力学ポテンシャルの変化は，次のようになる．

$$-\mathcal{V}\delta p=\frac{2e_1e_2}{\pi|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\int_0^\infty\frac{\sin(q|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|)}{q}$$
$$\times\left[1-\frac{4\pi e^2\beta}{\mathcal{V}q^2}\sum_k\sum_{k'}G_0(k+q,k;k'+q,k')\right]dq \tag{8.46}$$

この式によって，遮蔽効果が，グリーン関数の零成分を用いて与えられることになり，これは，e_1 と e_2 が充分小さければ，正確な式である．この式は，Bonch-Bruevich と Kogan (1959) とによって導かれた．G_0 に対する近似式として，(8.12) で与えられるものを使うと上式は，

$$-\mathcal{V}\delta p=\frac{2e_1e_2}{\pi|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\int_0^\infty\frac{\sin(q|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|)}{q}\frac{1}{1+(4\pi e^2\beta/vq^2)X(q,0)}dq \tag{8.47}$$

と書きなおせる．q が非常に小さいとき，X は (8.34) で与えられた値に近づく．それゆえ，$|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|$ の非常に大きい値に対して，熱力学ポテンシャルは，

$$-\mathcal{V}\delta p=\frac{e_1e_2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}\exp\left(-\frac{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|}{r_0}\right) \tag{8.48}$$

となる．ただし，遮蔽半径 r_0 は，古典論の場合には，

$$r_0=\sqrt{\kappa T/4\pi ne^2} \tag{8.49a}$$

で，また縮退したフェルミ気体に対しては，

$$r_0=\sqrt{k_F^2/12\pi nM^*e^2} \tag{8.49b}$$

で与えられる．

これらの結果は，次のようにしてもっと初等的な方法で出せる．電子間の相互作用の影響は，各々の電子と，それ以外のすべての電子が作る局所場との，相互作用にって記述できると考える．この仮定の下で，原点におかれた電荷 e_1 による電場を計算する．縮退したフェルミ気体の場合は，この近似は第Ⅲ章で議論したトーマス・フェルミ理論へ導く．古典的な場合，化学ポテンシャルが，一定という条件から，電子の密度

$$\rho(r)=\rho_0\exp[e\varphi(r)/\kappa T] \tag{8.50a}$$

が導かれる．ここで $\varphi(r)$ は局所的な静電ポテンシャル，ρ_0 は原点から遠
p. 146 く離れた点での電子密度で，これは正電荷の密度に等しい．縮退したフェルミ気体に対しては，

$$\rho(r)=(2M)^{3/2}[\mu+e\varphi(r)]^{3/2}/3\pi^2\,,$$
$$\rho_0=(2M)^{3/2}\mu^{3/2}/3\pi^2 \tag{8.50b}$$

を得る．そこで，ポアソン方程式を使い，右辺を $\varphi(r)$ のベキに展開してみょう．ただし，e_1 は非常に小さいと仮定するので，最初の項だけとる．古典論の場合には，これは，

$$\begin{aligned}\nabla^2\varphi(r)&=4\pi e[\rho(r)-\rho_0]\\&=4\pi e\rho_0\{\exp[e\varphi(r)/\kappa T]-1\}\\&\approx(4\pi e^2\rho_0/\kappa T)\varphi(r)\end{aligned} \tag{8.51a}$$

となり，Debye と Hückel (1923) によって求められた式と一致する．一方，縮退したフェルミ気体の場合は，

$$\nabla^2\varphi(r)=4\pi e(2M)^{3/2}\{[\mu+e\varphi(r)]^{3/2}-\mu^{3/2}\}/3\pi^2$$

$$\approx [4\pi e^2 \mu^{1/2}(2M)^{3/2}/2\pi^2]\varphi(r)$$
$$= (12\pi e^2 \rho_0 M/k_F^2)\varphi(r) \qquad (8.51\text{d})$$

となる．これら二つの方程式は，次の形の解をもっている．

$$\varphi(r) = (e_1/r)\exp(-r/r_0) \qquad (8.52)$$

ここで，遮蔽半径 r_0 は，上の二つの場合において，それぞれ (8.49a) および (8.49b) で与えられるものである．

6. その他の計算法の概観

この章，および，第V章で述べた結果を導くのに，いくたの，一見異なる手段が使われてきた．しかし，得られた結果はつねに同じであるから，種々の方法で用いられた近似は，お互いに密接に関連しているにちがいない．もっとも，その関係は，必ずしも明らかではない．これまでに使われた他のいくつかの方法を，ここ総括しておくのは有益であろう．それは，ある近似をするに至ったもとの物理的仮定が何であったかを示すのに，役立つかもしれないからである．第V章10節で，時間に依存するハートリー・フォックの方程式に基づいた，ひとつの別の解法について論じた．Bohm と Pines (1953) のもともとの方法は，集団座標（電子気体の場合ならば，プラズマ座標）を分離するような，正準変換を見つけようとするものであった．Tomonaga (1955b) は，この変数分離は近似的なものであるが，その誤差は，粒子の総数を N として，$N^{-1/2}$ に比例するということを強調した，このことについては，方程式 (5.55) を考えたとき，別の形で議論した．

p. 147
Sawada (1957) の方程式は，第二量子化の記号を使っているけれど，これと非常によく似ている．Sawada の論法は，一つの演算子 Q が，基底状態 $|\Psi_0\rangle$ から，エネルギー E_1 のある定常状態を生成するための条件が，

$$[H, Q]|\Psi_0\rangle = (E_1 - E_0)Q|\Psi_0\rangle \qquad (8.53)$$

で与えられることである．運動量 $\hbar q$ の状態を生成する，量も簡単な演算子は，

$$Q=\sum_k h_k a^\dagger_k a_{k-q} \tag{8.54}$$

である．ここで，h_k は，ある数係数をあらわす．ハミルトニアンが，

$$\sum_k\left(\frac{\hbar^2k^2}{2M}\right)a^\dagger_k a_k+\frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}\sum_{q'}V(q')a^\dagger_k a^\dagger_{k'}a_{k'+q'}a_{k-q'} \tag{8.55}$$

で与えられるとすると，上の交換子は，

$$[H,Q]=\sum_k[\hbar^2k^2/2M-\hbar^2(\mathbf{k}-\mathbf{q})^2/2M]h_k a^\dagger_k a_{k-q}$$
$$+\frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}\sum_{q'}V(q')h_k[a^\dagger_{k+q'}a^\dagger_{k'}a_{k'+q'}a_{k-q}+a^\dagger_{k'}a^\dagger_{k-q'}a_{k-q}a_{k'-q'}$$
$$+a^\dagger_k a^\dagger_{k'}a_{k'+q'}a_{k-q-q'}+a^\dagger_{k'}a^\dagger_k a_{k-q+q'}a_{k'-q'}] \tag{8.56}$$

となる．ポテンシャル・エネルギー演算子から由来する大部分の項は，それらを基底状態に働かしたとき，それらの効果が同位相でないために，小さな影響しか与えないだろうということである．しかし，$a^\dagger_k a_k$ のような組み合わせは，零位相をもつので，とくに重要と見なさねばならない．この理由から，この方法は，**乱雑な位相の近似**（**RP 近似**）と呼ばれている．交換子の中の同位相の項だけ残すと，

$$[H,Q]=\sum_k h_k\{\hbar^2k^2/2M-\hbar^2(k-q)^2/2M-\sum V(q')(n_{k+q'}-n_{k-q-q'})\}a^\dagger_k a_{k-q}$$
$$+\sum_k\sum_{k'}[V(q)-V(k'-k)]h_k(n_{k-q}-n_k)a^\dagger_{k'}a_{k'-q} \tag{8.57}$$

が得られる．数演算子 n_k として，無摂動系（零，または，有限温度の）における値をとることにして，この右辺が Q に比例する条件を見つけることができる．ＲＰ近似は，われわれが使って来た方法と，全く同じ結果を与える．同位相でない演算子の積を無視することは，丁度28図に示されたような構造をもったグラフを無視することと同じである．

われわれが使って来たグリーン関数法と，非常によく似た一つの方法が，Hubbard (1957) によって提案されている．Hubbard は，相互作用が，ある仮想的ボーズ粒子によって仲介される（場の理論では，実際，クーロン相互作用は，縦光子によって仲介される）と考え，そのようなボーズ粒子の性質が，媒質によりどのように変えられるかを調べた．一個のフェルミ線のル

p. 148

ープが，最も簡単なボーズ粒子の自己エネルギー部分になり，第一近似でこの部分を取り入れる．28図と29図のグラフは，そのようなボーズ粒子の，自己エネルギー部分だけを含んでいる．この方法では，相互作用の交換効果の部分を，簡単に取り入れることが可能である (Hubbard, 1958).

最近，これらの結果が，摂動論を使わずに得られることを示す論文がいくつか書かれている．Chen (1959) によって簡単な議論がなされ，Martin と Schwinger (1959) の論文は，この問題を詳しく扱っている．方法は，時間に依存するグリーン関数に対する微分方程式を書き下すのである．粒子間に，二体のポテンシャルがはたらいていると，n 粒子グリーン関数の導関数は，n 粒子，および ($n+1$) 粒子グリーン関数の，ある和で与えられる．たとえば，温度零で，正の t に対し (5—3) を微分したものは，

$$\begin{aligned}-iS'_k(t) &= \langle\Psi_0|a^\dagger_k \exp[-i(H-E_0)t]\,[H, a_k]\,|\Psi_0\rangle \\ &= T_k S_k(t) + \frac{1}{2}\sum_k \sum_{k''} \sum_{k'''} (V_{kk', k''k'''} - V_{kk', k'''k''}) \\ &\quad \times \langle\Psi_0|a^\dagger_k \exp[-i(H-E_0)t]\, a^\dagger_{k'} a_{k''} a_{k'''}|\Psi_0\rangle \qquad (8.58)\end{aligned}$$

を与える．(8.1) で定義された，有限温度のグリーン関数の導関数に対しても，同様な方程式が存在する．これらの，無限に結合した微分方程式の組をつくる方程式を解くのに用いられる近似は，ある次数 n_0 以上のすべてのグリーン関数が，低次のグリーン関数の，反対称された積で表わされると，仮定することである．このことは，多数の外線をもつすべてのグラフを，内線で結ばれていない独立な部分に分離することができ，したがって，どの部分も $2n_0$ 本以上の外線を持たないと仮定することである．$n_0=1$ にとれば，(8—58) の右辺のグリーン関数を，一粒子グリーン関数の積として書かねばならず，したがって，

$$-iS'_k(t) = T_k S_k(t) + \sum_{k'} (V_{kk', kk'} - V_{kk', k'k})\langle\Psi_0|n_k|\Psi_0\rangle S_k(t) \qquad (8.59)$$

が得られる．この方程式は，グリーン関数が，時間に指数関数的に依存することを示している．振巾は，

$$-\lim_{t\to+0} S_k(t)=\langle\Psi_0|n_k|\Psi_0\rangle \tag{8.60}$$

でなければならないから，指数に対する方程式は，他のグリーン関数の振幅
p. 149
とだけ結合する．(8.59) と，(8.60)，および $t<0$ に対する $S_k(t)$ の方程式には，非常に多数の可能な解が存在するが，それらの解の大部分は，次のような性質をもたない．

$$-S_k[t(1-i\delta)]\leq\exp(\mu' t\delta),\quad t>0 \text{ の時},$$
$$S_k[t(1+i\delta)]\leq\exp(\mu t\delta),\quad t<0 \text{ の時}. \tag{8.61}$$

ここで，δ は実の正数，μ と μ' は，それぞれ $N-1$ 粒子系，および，N-粒子系の，化学ポテンシャルである．この余分の条件は，すべての占有数 $\langle\psi_0|n_k|\psi_0\rangle$ は，0か1でなければならないことを示しており，したがって (8.59) は，伝播関数に対して，普通のハートリー・フォックの表式を与える．

『この方法は最近活潑に発展させられた．この方法は，多フェルミ粒子系の従来の理論の殆んどを再現できたし，また Kadanoff と Martin (1961) によって超伝導の理論にも応用されて成功した．理論の詳細な扱いは，Kadanoff と Baym (1962) の著書に与えられている．この書の中で重視されているのは，理論の輸送現象への応用で，ボルツマン方程式の種々の変形が考慮されている．』

7. 電気伝導度

第V章第4節で，一粒子グリーン関数が，どのように一粒子励起状態の減衰を記述できるかについて述べた．励起状態の寿命は，本質的には，時間に依存する伝播関数のフーリェ変換のピークの巾に逆比例する．同様にして，二粒子グリーン関数が，二粒子励起状態，および，粒子一空孔励起状態の寿命についての情報を与えることが期待される．外部からの摂動による，エネルギーの散逸を，最低の次数で決めるのは，そのような寿命である．それゆえ，二粒子グリーン関数から緩和過程の早さについて値を得ることが可能な

はずで，系の粘性係数や熱伝導度に対する表式を導くことが考えられる．

そのようなグリーン関数から，電気伝導度が得られることの，厳密な証明は，Kubo (1956) により行なわれた．ここでは，(8.46) でグリーン関数を用いて，遮蔽されたポテンシャルの表式を導いたのと同様な論法で，別の導出法を紹介する．正弦波の形で空間的時間的に変化し，振動数 ω，減衰率 γ，波数 q をもった，ある電場を，時刻 0 において加える．この摂動を，相互作用表示による演算子で書くと，

$$H_1(t)=-Ae\exp(iH_0t)\int[\rho(r)-\rho_0]\sin(\mathbf{q},\cdot\,\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$$
$$\cdot\exp(-iH_0t)\sin(\omega t)\exp(-\gamma t), \tag{8.62}$$

p. 150
となる．ここで，H_0 は外場のはたらいていない時の，系のハミルトニアンである．時刻 t におけるエネルギーの期待値は，

$$\overline{E}=\langle U^\dagger(t)\,[H_0+H_1(t)]U(t)\rangle \tag{8.63}$$

であり，$U(t)$ は，相互作用表示で表わした変換関数で，次の方程式を満たす．

$$i\frac{dU(t)}{dt}=H_1(t)U(t)$$
$$U(0)=1 \tag{8.64}$$

系が受取るエネルギーを見出すには，$U(t)$ に対する展開 (4.13) を使って，無限大の時刻における (8.63) を求めなければならない．零次の項は，初期エネルギーを与える．一次の項は，平均電子密度が，正電荷密度 ρ_0 に等しいことから消える．二次の項は，

$$\Delta\overline{E}=\int_0^\infty\int_0^\infty\langle H_1(t)\,[H_0,\,H_1(t')]\rangle dt\,dt' \tag{8.65}$$

を与える．H_1 の中に入ってくる唯一の演算子は，密度演算子のフーリェ成分である ρ_q と ρ_{-q} だけである．(8.45) からわかるように，この平均値は，(8.4) で定義されたグリーン関数で与えられる．(5.21) で定義された強度関数に対応した，真の強度関数を $g_q(x)$ として，フーリェ展開を，

$$\langle[\rho_q(t)-\rho_{-q}(t)]\,[\rho_{-q}(t')-\rho_q(t')]\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}g_q(x)e^{ix(t-t')}dx \tag{8.66}$$

と書くと，(8—65) を計算して，

$$\lim_{\gamma\to0}\gamma\Delta\overline{E}=\frac{1}{16}\pi A^2e^2[\omega g_q(\omega)-\omega g_q(-\omega)] \tag{8.67}$$

が得られる．この問題では，一般に運動量の保存を仮定することはできない．なぜなら，電気抵抗をひきおこすような過程は，一般に運動量を保存しないからである．すなわち，イオンが電子の熱散乱，または，不純物散乱を通して，電子から運動量を受取るからである．その結果，ρ_q^2 の期待値は，電子気体に対して零であったけれども，いまの場合には，零と仮定できないわけである．

物質の電気伝導度を，$\sigma(q,\omega)$ とすると，(8.62) で記述される外からのポテンシャルが，系に与えたエネルギーは，電流密度と電場のスカラー積を，空間と時間について積分して計算される．その結果，

$$\lim_{\gamma\to0}\gamma\Delta\overline{E}=\frac{1}{8}A^2\mathcal{V}kq^2\sigma(\mathbf{q},\omega) \tag{8.68}$$

p 151
となる．(8.67) と (8.68) とを比べて，電気伝導は，

$$\sigma(\mathbf{q},\omega)=\frac{1}{2}\pi e^2[\omega g_q(\omega)-\omega g_q(-\omega)]/\hbar^2q^2\mathcal{V} \tag{8.69}$$

となることがわかる．この方法は，伝導度の実数部分しか与えないので，虚数部分を計算するためには，別の方法を使わなければならない．虚数部分は，エネルギーの散逸を与えない．

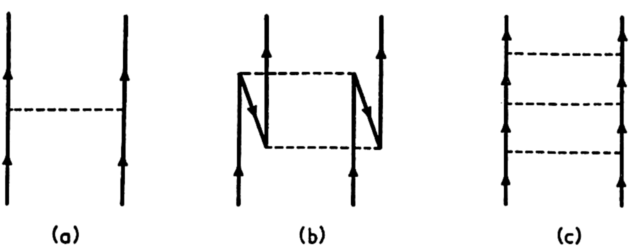
『Kubo 理論は電子気体の電気抵抗を計算するために，Langer (1962) によって用いられた．』

8．超伝導体における集団運動

この章でのべたアイディアは 平面波の行列式の代りに Bardeen 達(1957)によって提案された型の波動関数を，第一近似にとることによって，超伝導

の理論にも応用できる．その結果，運動量に比例したエネルギー量子をもった，新しい型の集団励超が導き出される．このことは，Anderson (1968) と Bogoliubov (1959) により示された．しかし，絶対零度で，クーロン相互作用の長距離部分を考慮すると，この新しい集団運動は現われない (Anderson, 1958)，このモードの存在によって生ずる相関の型と，クーロン相互作用を遮蔽するために必要な相関の型とは，相容れないように見える．エネルギー・ギャップより少さい励起エネルギーをもった，別の型の集団励起があるのかもしれない．『これらのことについては，Bardeen と Schrieffer (1961) が，総合解説の中で議論しており．そのようなモードの詳細な計算は Vaks 達 (1961) によって行われた．』

調べなければならないグリーン関数は，(5.62) で定義されたものであり，重要なグラフは30図に示されたような，梯子型のものである．これらのグラフは，温度が高温から，臨界温度に近づくとき，発散するような和を与える．この発散の意味するところは，集団運動が，不安定になり，基底状態以下では，別の集団運動を選び直さねばならないということである．臨界温度以下で，第一近似として，BCS 波動関数を用いると，問題はさらに複雑になる．というのは，(6.42) と (6.36) で定義された，無摂動系のハミルトニアンは，粒子と空孔を混合するからである．その結果，29図と30図のグラフは，もはや区別がつかなくなり，これら二種のグラフは，一緒に考慮しなければならなくなる．これが，Anderson の集団運動と，プラズマ振動との干渉の原因であり，結局，絶対零度で，Anderson の集団運動を消滅させるのであ



30図　はしご型グラフ

る.

『超伝導体あるいは類似の系中の集団運動の理論は，一般化した時間に依存するハトリー・フォック理論からも得られる．一粒子密度行列の運動方程式は二粒子密度行列を含み，一方対関数の運動方程式の中には三個の消滅演算子と一個の生成演算子の積の期待値が含まれる．一粒子密度行列に対する近似 (6.59) を用いると，一組のとじた非線型方程式が得られ，同様の近似は三個の消滅演算子と一個の生成演算子の積の期待値を，密度行列 ρ と対関数 $\varkappa$ の反対称化した積の形に与える．(6.59) 式を (2.27) に代入すると，絶対零度で成立つ行列方程式として

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t}=[T+U,\rho]+W\varkappa^{+}-\varkappa W^{+} \tag{8.70}$$

が得られる．ここに T は運動エネルギー演算子，U は (5.73) で与えられる普通のつじつま合ったポテンシャルで，W はつじつま合った対ポテンシャルを表わし，その行列成分は配置空間で

$$W(\mathbf{r},\mathbf{r}')=V(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\varkappa(\mathbf{r}',\mathbf{r}), \tag{8.71}$$

あるいはもっと一般の表示では

$$W_{pq}=\sum_{r,s}V_{pq,rs}\varkappa_{sr} \tag{8.72}$$

で与えられる．対関数に対する方程式は同様にして

$$i\hbar\frac{\partial\varkappa}{\partial t}=[T+U,\varkappa]-W\rho^{*}-\rho W \tag{8.73}$$

となる．これらの方程式と副条件 (6.60) を組合せると，第V章10節の理論と同じ構造の理論をつくることができる．準粒子変分問題の解は，これらの方程式の定常解を与え，集団運動の理論は，これらの方程式を定常解の周りで線型化して得られる．この方法は Gorkov (1958)，Boyoliubov (1959)，Baranger (1961)，Valatin (1961) 達の論文中に記述されている.』

"The Many-Body Problem" には，集団運動の理論が，Bohm によって与えられ，その金属電子への応用が，Pines によって論じられている.

第IX章　ボーズ粒子

1. まえがき

p. 153

これまでは専ら相互作用のあるフェルミ粒子の系ばかり取扱い，相互作用のあるボーズ粒子の系は全然議論しなかった．フェルミ粒子に使えた方法の殆んどすべてが，ボーズ粒子にも使え，その逆も言えるので，多ボーズ粒子系についての詳しい議論ははぶき，その一般的な性質のいくつかについてだけ述べることにする．後に見るように，ある意味では多ボーズ粒子系の問題の方が，多フェルミ粒子系の問題よりも簡単である．しかし一方，理論が適用できる物理的な実例が少いので，実験との比較は多フェルミ粒子系の理論の場合よりも一層困難である．

多ボーズ粒子系とみなされる系に二つの型がある．第一の型は，粒子が有限の質量をもち，ボーズ粒子数が保存されるものである．第二の型はボーズ粒子数が保存されないものである．第一の型の系の唯一の例は液体ヘリウムである．勿論，ボーズ粒子から成る液体はほかにも沢山あるが，それらは本質的に古典液体で，分子がボーズ・アインシュタイン統計に従うという事実は重要でない．液体ヘリウムは，どんなに低い温度にしても液体のままであることから明らかに量子流体である．

第二の型の例として最もよく知られているのは，電磁波だけでみたされ，それを取囲む壁と熱平衡にある空洞である．この場合のボーズ粒子は光子であって，少くとも 10^9 度以下の温度では本質的に相互作用はないと見なすことができる．そのために，空洞輻射の理論は簡単でよく理解されているが，同じことがこの種の他の系についても言えるとは限らない．ボーズ・アインシュタン統計に従う粒子の他の例は固体内のフォノン（音量子）である．光子は

それ自身で粒子と見なされるが，フォノンはそうでなく，フォノンを運ぶ媒p. 154 質を考えなければならない．結晶中の原子の復元力が調和力でない結果，フォノン同志の間に相互作用がある．もっと重要なこととして，金属中ではフォノンは価電子とも相互作用するので，われわれは相互作用するフェルミ粒子とボーズ粒子の集りを考えなければならない．

このほかにもボーズ系の例は種々存在する．固体内のフォノンの場合，固体を構成する原子がフェルミ粒子であるか，ボーズ粒子であるかによって別に差は生じない．すなわち，固体の原子は普通古典的粒子と見なせるのである．零音波とプラズマ振動を議論した時見たように，フェルミ的性格の強い系の中にも，フォノンに似た励起が存在しうる．フォノンに似た励起はボーズ粒子系にも存在し，以下に示すように液体ヘリウムの低い励起はフォノンである．フォノンに似た励起は強磁性体や反強磁性体でも非常に重要で，この場合重要な励起はスピン波と呼ばれ，ボーズ粒子のごとく振舞う．これら様々の型の励起を扱う理論はすべて似かよっている．いずれの場合も，ボーズ粒子と媒質の相互作用を考えに入れることが必要で，一番簡単な理論を改良するためにも，ボーズ粒子が真の粒子でない事実を考慮しなければならない．

2．液体ヘリウム

相互作用のあるボーズ粒子系について最も興味ある問題は，液体ヘリウムの超流動性と，それに関係した性質によって提起された問題である．第VI章でふれたように，理想ボーズ気体のボーズ・アインシュタイン凝縮と，超流動性の発生とは何か関係があるように思われる．しかし完全に相互作用のないボーズ粒子の気体は，超流動性液体ヘリウムの特性のどれをも持たないので，何らかの方法で相互作用を考慮しなければならないのは明らかである．この問題については最近 Atkins (1959) の著書に詳しい解説があるので，ここではこの問題の重要な断面の概観だけを与え，相互作用のあるボーズ粒子系の理論が，フェルミ粒子系の理論として今まで述べてきた諸方法とどの

ように関係づけられるかを示すことにする.

独立粒子近似は多フェルミ粒子系の問題では非常に有用で ハートリー・フォックの方程式を調べることによって非常に多くの情報が得られた. しかしこの近似は,相互作用のあるボーズ系の場合,余り役に立たない. 波動関数は一粒子波動関数の対称的な積で, 一粒子波動関数はすべて同じものであってもよい. 粒子間の力が弱い斥力であれば, 最良の積の形の波動関数は, 多分運動量0の平面波の積で, これは粒子間の相関をできるだけ小さくする. 一
p. 155
方力が引力であると, 粒子を空間的に局在させた方が低いエネルギーが得られる. このように反撥力は運動量空間における凝縮, すなわちボーズ凝縮を助けるが, 引力はボーズ・アインシュタイン凝縮をさまたげ, その代りに座標空間における凝縮に有利にはたらくことがわかる. この種の議論は Gross (1960) によって詳しく与えられている.

相互作用の影響を示すために, 次のような非常に簡単化した解ける模型を考えよう. 粒子は運動エネルギーをもたず (すなわち質量が無限大), 短距離ポテンシャルの対角成分を通じてだけ相互作用するものと仮定する. 一般的な局所的ポテンシャルは

$$\sum_{\mathbf{q}}\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\mathbf{k}'} V(q)\, b^{\dagger}_{\mathbf{k}} b^{\dagger}_{\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} b_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} \tag{9.1}$$

の形であるが, もし非常に短い到達距離をもてば. $V(q)$ は定数で $V(0)$ に等しいととることができる. すると対角成分は

$$\begin{aligned}
&\sum_{\mathbf{k}} V(0) n_{\mathbf{k}}(n_{\mathbf{k}}-1)+\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\mathbf{k}'\neq\mathbf{k}}[V(\mathbf{k}-\mathbf{k}')+V(0)]\,n_{\mathbf{k}}n_{\mathbf{k}'}\\
&=2\sum_{\mathbf{k}}\sum_{\mathbf{k}'} V(0) n_{\mathbf{k}}n_{\mathbf{k}'}-\sum_{\mathbf{k}} V(0)(n_{\mathbf{k}}^2+n_{\mathbf{k}})\\
&=(2N^2-N)V(0)-V(0)\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}^2
\end{aligned} \tag{9.2}$$

となる. $n_{\mathbf{k}}$ は粒子数演算子 $b^{\dagger}_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}$ で, N は粒子の総数である. ポテンシャルが引力であると, $V(0)$ は負で上の式は極小値

$$E_0=2(N^2-N)V(0) \tag{9.3a}$$

をもつ. この値はすべての占有数 $n_{\mathbf{k}}$ が1か0の時に得られ, したがってボ

ーズ・アイアンシュタイン凝縮はおこらない．この模型では，たとえ運動量空間の凝縮を有利にする運動エネルギーを考慮してもこの結論はかわらない．しかしもし $V(0)$ が正であると，(9.2) は占有数のうち一つが N で，他はすべて 0 である時極小値

$$D_o=(N^2-N)V(0) \tag{9.3}$$

をもつ．それゆえ反撥的な相互作用はボーズ・アインシュタイン凝縮に有利にはたらく．

この模型は反撥相互作用の効果を強調しすぎている．凝縮体(Condensate)から一つの粒子を励起することにより得られる最も低い励起状態は

$$E_1-E_0=2(N-1)V(0) \tag{9.4}$$

で与えられるエネルギー E_1 をもち，したがってこの模型では，丁度超伝導理論で現われたような，系のひろがりに無関係な大きさのエネルギー・ギャップが予期される．これは超流動のあらわれる事実を説明するかも知れない
p. 156 が，Hugenholtz と Pines (1959) がかなり一般的な根拠に基づいて証明したように，液体ヘリウムのスペクトルはエネルギー・ギャップを持つことができないはずである．その上この模型は一次の相転移を与えるのに対し，実際に観測されているのは二次の相転移である．N_0 個の粒子が一つの準位に凝縮し，残り B 個の準位の中，f_1B 個は一重に占められ，f_2B 個は二重に占められ，というように以下同様であるとすると，粒子の数，エネルギー，エントロピーは次で与えられる．

$$N=N_o+B\sum_n nf_n$$

$$E=V(0)[2N^2-N-N_0^2-B\sum_n n^2f_n]$$

$$S=\kappa\log\frac{B!}{(f_1B)!(f_2B)!\cdots[(1-f_1-f_2\cdots)B]!}$$

$$\approx\kappa B[-\sum_{n=1}f_n\log f_n-(1-\sum_{n=1}f_n)\log(1-\sum_{n=1}f_n)]. \tag{9.5}$$

$E-\mu N-TS$ を N_o と f_n について極小ならしめると

$$(4N-2N_o)V(0)-\mu=0$$

$$-BV(0)n^3+4BnNV(0)-\mu Bn+\kappa TB\log[f_n/(1-\sum_n f_n)]=0 \quad (9.6a)$$

が得られる．これらの方程式の解は

$$N=N_0+B[\exp(2N_0V(0)/\kappa T)-1]^{-1} \quad (9.7)$$

である．与えられた温度に対してこの式は極小値をもち，したがって凝縮した相の密度は一定の値以下になりえない．密度がこの極小値より小さいとき N_0 は 0 でなければならず，正常状態の相が存在し，その分布は

$$4nNV(0)-\mu n+\kappa T\log[f_n/(1-\sum_n f_n)]=0 \quad (9.6b)$$

で与えられる．高密度相から低密度相への転移は突然おこり，N_0 は連続的に 0 になれないため一次の相転移になる．(9.7) から N は温度 0 の時だけ 0 になることがわかる．

Bogoliubov (1947) の準粒子の方法は，Bogoliubov と Zubarev (1955) によりさらに展開されたが，この方法を用いると，相互作用のあるボーズ気
p. 157
体がなぜ超流性をもつかを理解することができる．そのような性質を得るために，前の二小節に述べたような思い切った仮定を設ける必要はない．その方法は第VI章 7 節で超伝導理論に関連して議論した方法と非常に似ている．ボーズ気体の基低状態では粒子の有限の部分が運動量零の準位にあり，したがってこの運動量零の準位に対応する発生および消滅演算子は別々に取扱える．その他の演算子は (6.36) 式と類似した方程式を用いて準粒子の演算子として書改められる．(6.36) 式とちがう点は，符号が変わるのと，電子のスピンを表わす添字を落す点だけである．これらの準粒子の演算子は一定の運動量をもつ粒子をつくり出す演算子と，それと反対向きの運動量をもつ粒子を消す演算子の一次結合である．超伝導の問題において，変換係数を適当に選ぶと，準粒子が存在しない状態の方が，無摂動系のフェルミ気体よりも低いエネルギーをもつようにできたが，丁度それと同じようにいまの問題でも，ボーズ粒子間の力が反撥力であれば，係数を適当に選んで，零でない運動量をもつ準粒子のない状態の方が，摂動のないボーズ気体よりも低いエネルギーをもつようにできる．もっと著しいことは，励起エネルギーは，相互

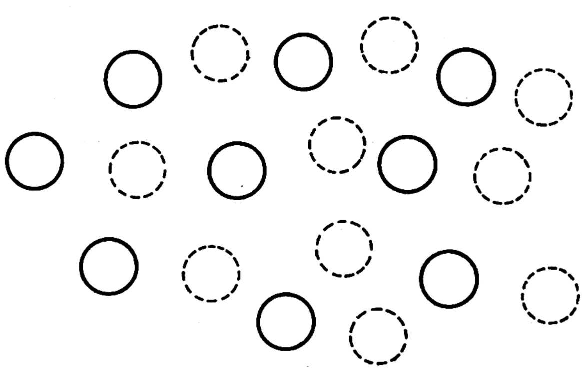
作用のないボーズ粒子の場合には，運動量の二次式であるのに反して，いまの場合，運動量の小さい値に対して一次式になることである．ずっと以前に Landau (1941) によってそのようなエネルギー・スペクトルが，超流動性の発生を説明し，またヘリウムの低温の比熱の実験とも一致することが示されていた．エネルギーと運動量の比は音速に等しく，実際この低いエネルギーをもつ励起状態は フォノンにほかならないのである．『この方法の注意深い議論は最近 Luban (1962) によって与えられた．』

準粒子変換の必要性は，すべての粒子が運動量零の準位にある状態に，相互作用がどんな影響を及ぼすかを考えて見ると明瞭になる．運動量零の準位にある粒子は，お互同志衝突してその結果，反対の運動量をもつ一対の準位へ散乱される．干渉効果のために，励起されて対になっている粒子同志がさらに散乱をくりかへす効果の方が，一つの対と別の対との相互作用よりも重要になる．したがって基底状態は超伝導の BCS 理論における基底状態に非常に似ている．準粒子はある程度ボーズ・アインシュタイン凝縮によって安定にされている．なぜならば準粒子のエネルギーが運動量とともに急激に変化すると崩壊をはじめるが，凝縮していない相におけるよりも凝縮した相における方が崩壊がより困難になるからである．第VI章 9 節で原子核や他のフェルミ粒子系でも対形成が同様な効果をもつことを議論した．

しかしこれら二つの理論の間にはいくつかの重大な相異点が存在する．フ
p. 158
ェルミ粒子系では超流動状態は引力によって作られるが，ボーズ系では反撥力が必要である．フェルミ系では励起スペクトルは独立粒子模型（ハトリー・フオック近似）で 0 までつながっていて，準粒子模型でエネルギー・ギャップが現われた．ボーズ系では独立粒子模型でエネルギー・ギャップがあり，準粒子模型になると，スペクトルは 0 まで線型に減少する．したがって，ある意味では対の形成は二つの場合相反する効果を示す．二つの理論の比較は Valatin と Butler (1958) によってなされている．

液体ヘリウムに対しては Feynmam (1953) の大変エレガントな理論がある．Feynman はボーズ粒子の問題だけにある簡単さを利用し，フェルミ粒

子の問題では成功しなかったいくつかのアイデアを用いた．最も重要な簡単さは基底状態の波動関数が実数でいたるところ正であるという事実である．このことは至極簡単に証明できる．Ψ を任意の対称的な波動関数とすると，$|\Psi|$ もまた対称的な波動関数である．その上ハミルトニアンの期待値は $|\Psi|$ について求めたものは Ψ について求めたものより大きくなり得ない．したがって変分原理によって，基底状態の波動関数はつねに実で正に選べることがわかる．この事実を用いると波動関数を直観的に画き出すことが可能になる．系のあらゆる粒子の位置を図示し，特定の位置の組を配置と呼ぶことにする．多くの可能な配置があるが，その各々の配置に対し波動関数は一定の数値を与える．基底状態では各々の配置にあてがわれる数値はつねに正であり，もし粒子が互にうまくはなれておればその値は大きく，また粒子が重なり合って強い反撥が粒子間にはたらけば，数値は小さくなる．どの励起状態も基底状態と直交しなければならないから，大雑把にいって，配置の約半分に正の数値が与えられ，残りの約半分に負の数値があてがわれる．Feynman の論点は，粒子が区別つかないために，相当量の運動エネルギーを費やすのでなければ，上述の性質をもった励起状態を見つけることは難しいということである．たとえば31図で，実線の円で示した位置にすべての粒



31図 実線の円は励起状態の波動関数を正にするような配置の典型的なもの，破線の円は波動関数を負にするような配置である．

子があるとき，波動関数は正で，破線で画いた円の位置にあるとき負になり，この二つの両端を連続的に変わるような波動関数が考えられるかも知れない．しかしそのような波動関数は，r_o を粒子間の平均距離として，$h^2/2Mr_0^2$ の程度の運動エネルギーを与える．確かに可能な励起の一つの型は密度の振動である．しかしこれは音波にほかならず，そのエネルギーは運動量に比例する．

p. 159

Feynman の第二の論文 (1954) で示されたように，エネルギー・スペクトルを定量的に評価することは変分原理を用いてなされる．ある演算子 Q が基底状態 $|\Psi_o\rangle$ に作用すると $|\Psi_o\rangle$ に直交する状態がつくられるものとすると，明らかに

$$\frac{\langle\Psi_o|Q^\dagger HQ|\Psi_o\rangle}{\langle\Psi_o|Q^\dagger Q|\Psi_o\rangle}-E_o=\frac{\langle\Psi_o|Q^\dagger[H,Q]|\Psi_o\rangle}{\langle\Psi_o|Q^\dagger Q|\Psi_o\rangle} \tag{9.8}$$

は第一励起状態の励起エネルギーに対する上限を与える．

Ψ_o を基底状態の波動関数とすれば，運動量 $\hbar\boldsymbol{q}$ の励起状態として一つの可能な試行波動関数は

$$\Psi_{\mathbf{q}}=\sum_{j=1}^{N}\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j)\Psi_o \tag{9.9}$$

である．ここで和はすべての粒子の座標 r_j についてとる．

これは Q として局所的な一粒子演算子をとることに対応する．この試行波動関数を用いて (9.8) の分子は容易に計算でき，結果は，$Nq^2/2M$ となる．分母は対相関関数と関係があり，実験的にきめられる量である．このことを使って，エネルギー・スペクトルが求まるが，そのスペクトルは液体ヘリウムの熱力学から帰納されるスペクトルよりもつねに大きい値を与える．しかし正しい一般的な性質はそなえている．計算は少しむつかしくなるが，もっとよい試行関数か Feynman と Cohen (1956) によって提案され実験とよりよく合う結果が得られている．

基底状態波動関数の簡単な性質を利用する他の例は Dyson (1957) の論文に与えられている．この論文で Dyson は，剛体球のボーズ気体のエネル

p. 160
ギーに対する上限と下限を計算することができた．しかしこれら両限は互に余り接近していないので，この方法はエネルギーに対して正確な答は与えてくれない．

相互作用のあるボーズ粒子系の性質を，いろいろな形で摂動論を使って計算したものがいくつか存在する．超流動性を与えるものは，ヘリウム原子間の反撥力であるらしく，引力はむしろ超流動性の現われるのをおさえるので，短距離反撥力を通して相互作用するボーズ粒子——すなわち剛体球ボーズ粒子——の問題が，専ら注目されてきた．引力はヘリウムがともかくも液体であるという事実に寄与しているにちがいないが，Huang (1960) は原子が接近したときの斥力と同時に，中間距離での引力も考慮することに成功している．剛体球の気体では運動量空間で表わしたポテンシャルの行列成分が無限大になるという問題がいつも起る．この困難を逃げる一つの方法は，第Ⅳ章7節で議論した Brueckner 理論を用いることである この方法は Brueckner と Sawada (1957) によって採用された．もう一つの方法はポテンシャルをそれと同じ散乱効果を与えてくるような“擬似ポテンシャル”ですりかえる方法である．この方法は Huang と Yang (1957) によって展開され剛体球ボーズ粒子の問題に Lee と協力著 (1957) によって応用された．“擬似ポテンシャル”の方法はさらに Abe (1958) によって一度に二粒子以上の衝突が考慮できるよう拡張された．

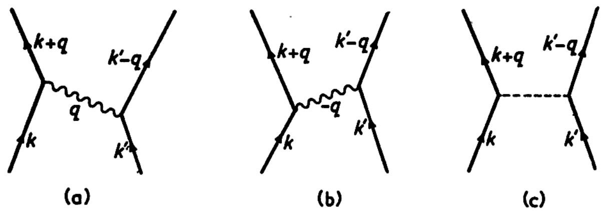
Matsubara (1953) の有限温度における摂動論は，ボーズ系にも使えることはこの方法を扱った大低の論文に注意されている (第Ⅶ章2節の文献参照)．無摂動系の伝播関数は，(7.10) で定義した無摂動系のフェルミ粒子の伝播関数と似ていて，ちがいは $(1-f_k)$ および $-f_k$ がそれぞれ (N_k+1) と N_k でおきかえられる点である．ただし N_k はボーズ・アインシュタインの統計因子 $\{\exp[\beta(\epsilon_k-\mu)-1\}^{-1}$ である．この摂動展開は別の形で Lee と Yang (1959 a) によって発展させられ，この人達は相互作用のあるボーズ粒子系の問題を詳しく調べるのに摂動論を用いた (Lee と Yang 1959b, 1960)．

3. フォノン

フォノン同志の相互作用，およびフォノンと金属中の電子との相互作用の影響を理解するという一般的な問題は，非常にこみ入った問題で，これまで余り進歩していない．困難の一つは相互作用の形を理論的にもきめることが容易でないという点であるが，しかしこれを別にしても，相互作用しているボーズ粒子とフェルミ粒子の系をとり扱う一般的な方法はまだ展開されていない．その結果，多体問題の方法が成功をおさめているのはごく少数の特殊な場合だけである．

p. 161

低い励起エネルギーをもつ高密度の電子と，高エネルギーのフォノンを問題にするならば，電子を，フォノンを交換し合っている静止した粒子として扱うことができ，したがって電子間にみかけ上の力があらわれる．これは核力の中間子論と非常に密接に類似していて，低エネルギーの核子が高いエネルギーの中間子を交換する効果は静的な核子ポテンシャルに焼き直せる．この類似については第 VI 章5節で論じた．摂動論の言葉でいえば，これは32(a) や32(b) 図に示されたグラフを32(c) 図で示されたものでおきかえることに相当する．フォノン交換には，ある長さの時間を要するが，それと同等な電子間の瞬間的相互作用でおきかえるのである．この際有限温度の摂動論を使うか，基底状態の摂動論を使うかは問題でない．というのは，われわれが興味をもつ高エネルギーのフォノン準位が占められる確率は非常に小さいからである．第VI章5節に与えた一連の規則を用いると32(a) と (b) の二つのグラフからの寄与は



32図　二個の電子間のフォノン交換を表わすグラフと，それと同等な瞬間的相互作用を表わすグラフ

$$\frac{[g(q)]^2}{-E-\hbar\omega(q)-\delta}+\frac{[g(q)]^2}{-E-\hbar\omega(q)+\delta}$$
$$=-\frac{2[E+\hbar\omega(q)]\,[g(q)]^2}{[E+\hbar\omega(q)]^2-\delta^2} \qquad (9.10)$$

となる．E は相互作用のおこった時刻におけるすべてのグラフの平均エネルギー，$\hbar\omega(q)$ はフォノンエネルギー，$g(q)$ はフォノン一電子相互作用の行列成分，δ は電子のエネルギー変化で

$$\delta=\frac{1}{2}(\varepsilon_k+\varepsilon_{k'-q}-\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_{k'}) \qquad (9.11)$$

で与えられる．(9.10) が電子間の有効相互作用を与えるためには，フォノ
p. 162
ンのエネルギーが非常に高くて，一つの電子から他の電子への移り変りが充分速かに起り，そのためフォノンがとび交う間に系の残りの部分に何の変化も起さないことが必要である．もしこの条件がみたされなければ，E はきまらない．この条件がみたされているときには，(9.10) の右辺の比は正で有効相互作用は引力になる．電子がフォノンのエネルギーと同程度のエネルギーで励起されない限り，有効相互作用は電子のエネルギーにはあまり強く依存しない．Fröhlich (1950) によるこの方法は，電子の励起エネルギーが，デバイ・エネルギーより小さい時には，電子—電子相互作用を一定にとり，そうでない時には相互作用を 0 とする Bardeen 達のやり方 (1957) を正当化している．

この近似は電子の密度が高い時だけ妥当で，もしそうでない時フォノンの速い交換は不可能になるから近似はゆるされない．電子の密度が低いと異なる価電子間の相互作用は重要でなくなり，一つの電子と格子の間の相互作用だけを考えればよいことになる．この相互作用は電子の静止エネルギーと有効質量を変化させる．自分の周りの格子と平衡を保ちながら動く電子は**ポーラロン**と呼ばれている．この問題で重要な格子振動は普通のフォノンではなくて，イオンがその取巻く価電子と反対向きに動くような縦波である．これはまさにプラズマ振動であって，よい近似で一定の振動数をもつと考えてよい．電子は量子的場と相互作用している，古典的粒子のように扱える．弱い

結合の極限での計算は Pekar (1946) により，また強結合の場合は Lee とその協力者 (1953) によってなされ，一方中間結合の場合にも妥当と思われる方法が Feynman (1955) によって用いられた．この問題の解説は Allcock (1956) によって書かれており，また一般的な扱いが最近 Gross (1959) によって与えられた．

前にも述べたように，もっと他の型のボーズ的励起が存在する． Sawada (1957) の方法はフェルミ粒子系にも，そのような励起が存在することを示し，フェルミ粒子が電荷を帯びているか，中性かに応じて，それらはプラズマ量子または零音波のフォノンになる．超流動性のフェルミ粒子系にもフォノンがあり (Anderson, 1958)．またフェルミ粒子系にスピン波が存在するかも知れない (Abrikosov & Khalatnikov 1959) 液体ヘリウム中にも古典液体中にもフォノンは存在し，強磁性体や反強磁性体にはスピン波が存在する．量子力学的見地からすれば，これらの励起はすべて似ていて，それらの性質は同じ形式的手段で研究することができる．

相互作用のあるボーズ粒子系の理論は "The Meny-Body Problem" (Methuen 1959) の中で， Brueckner, Beliaev および Huang によって議論されている．

参 考 文 献

書の中で引用した章および節の番号は最後の [ ] の中に記入してある.

Abe, R. (1958). *Progr. Theoret. Phys. (Kyoto)* **19**, 1 [9.2].

Abrikosov, A.A. and Khalatnikov, I.M. (1959). *Repts. Progr. Phys.* **22**, 329 [5.5, 5.6, 9.3].

Allcock, G.R. (1956). *Advances in Phys.* **5**, 412 [9.3].

Amado, R.D. (1958). *Phys. Rev.* **111**, 548 [4.7].

Anderson, A.C., Salinger, G.L., and Wheatley, J.C. (1961a). *Phys. Rev. Letters* **6**, 443 [5.5].

Anderson, A.C., Reese, W., Sarwinski, R.J., and Wheatley, J.C. (1961b). *Phys. Rev. Letters* **7**, 220 [5.5].

Anderson, A.C., Salinger, G.L., Steyert, W.A., and Wheatley, J.C. (1961c), *Phys. Rev. Letters* **6**, 331 [6.8].

Anderson, A.C., Reese, W., and Wheatley, J.C. (1963). *Phys. Rev.* **130**, 495 [5.5].

Anderson, P.W. (1958). *Pnys. Rev.* **112**, 1900 [6.4, 6.5, 8.8, 9.3].

Anderson, P.W., and Morel, P. (1961). *Phys. Rev.* **123**, 1911 [6.8].

Atkins, K.R. (1959). "Liquid Helium," Cambridge Univ. Press, London and New York [9.2].

Aviles, J.B. (1958). *Ann. Physics* **5**, 251 [3.7].

Ayres, R.U. (1958), *Phys. Rev.* **111**, 1453 [2.4].

Baranger, M. (1961). *Phys. Rev.* **122**, 992 [6.9, 8.8].

Bardasis, A., and Schrieffer, J.R. (1961). *Phys. Rev. Letters* **7**, 79 and 472 [6.8].

Bardeen, J. (1956). In "Handbuch der Physik", Vol. XV, pp. 274-369. Springer, Berlin [6.3].

Bardeen, J., Cooper, L.N., and Schrieffer, J.R. (1957). *Phys, Rev.* **108**, 1175 [6.4, 6.5, 6.7, 7.1, 8.8, 9.2, 9.3]

Bardeen, J., and Schrieffer, J.R. (1961). "Progress in Low Temperature Physics," Vol. III, p. 170, North-Holland, Amsterdam [6.7, 8.8].

Bell, J.S. (1962). In "Lectures on the Many-Body Problem," p. 91, ed. Caianiello. Academic Press, New York [5.4].

Bell, J.S., and Squires, E.J. (1961). *Advances in Phys.* **10**, 211 [4.7].

Belyaev, S.T. (1959). *Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd.* **31**, No.

11 [6.9].

Bethe, H.A. (1956). *Phys. Rev.* **103**, 1353 [3.5, 4.1, 4.7, 4.8].

Bethe, H.A., and Bacher, R.F. (1936). *Revs. Modern Phys.* **8**, 82 [3.4].

Bethe, H.A., and Goldstone, J. (1957). *Proc. Roy. Soc.* **A238**, 551 [4.7].

Bethe, H.A., Brandow, B.H., and Petschek, A.G. (1963). *Phys. Rev.* **129** 225 [4.7].

Betts, D.S., Osborne, D.W., Webber, B., and Whilks, J. (1963). *Phil. Mag.* **8**, 977 [5.5].

Biondi, M.A., Forrester, A.T., Garfunkel, M.P., and Satterthwaite, C.B. (1958). *Revs. Modern Phys.* **30**, 1109 [6.3].

Bloch, C., and De Dominicis, C. (1958). *Nuclear Phys.* **7**, 459 [7.2].

Bloch, C., and De Dominicis, C. (1959). *Nuclear Phys.* **10**, 181 [7.2, 7.5].

Bloch, F. (1928). *Z. Physik* **52**, 555 [6.5].

Bogoliubov, N.N. (1947). *J. Phys.* (U.S.S.R.) **11**, 23 [9.2].

Bogoliubov, N.N., and Zubarev, N. (1955). *Zhur. Eksp. i. Teoret. Fiz.* **28**, 129: translation in *Soviet Phys. JETP* **1**, 83 (1955) [9.2].

Bogoliubov, N.N., Zubarev, D.N., and Tserkovnikov, Iu. A. (1957). *Doklady Akad. Nauk S. S. S. R.* **117**, 788: translation in *Soviet Phys. Doklady* **2**, 535 (1958) [6.7].

Bogoliubov, N.N., Tolmachev, V.V., and Shirkov, D.V. (1959). "A New Method in the Theory of Superconductivity," pp. 31-49. Consultants Bureau, New York [6.5, 8.8].

Bogoliubov, N.N. (1959). *Uspekhi Fiz. Nauk* **67**, 549: translation in *Soviet Phys. Uspekhi* **2**, 236 [6.7, 8.8].

Bohm, D., and Gross, E.P. (1949). *Phys. Rev.* **75**, 1851 [8.3].

Bohm, D., and Pines, D. (1953), *Phys. Rev.* **92**, 609 [5.7, 8.3, 8.6].

Bohr, A., and Mottelson, B.R. (1953). *Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-fys. Medd.* **27**, No. 16 [5.7].

Bohr, A., and Mottelson, B.R, (1958). *Kgl. Norske Videnskab. Selskab Forh.* **31**, 71 [5.7].

Bonch-Bruevich, B.L., and Kogan, Sh. M. (1959). *Fiz. Tverdogo Tela* **1**, 1221 [8.3, 8.5].

Bonch-Bruevkich, V.L., and Kogan, Sh. M. (1960). *Ann. Physics* **9**, 125 [8.1].

Brout, R. (1957). *Phys. Rev.* **108**, 515 [8.4].

Brown, G.E. (1959). *Revs. Modern Phys.* **31**, 893 [5.4].

Brown, G.E., and Bolsterli, M. (1959). *Phys. Rev. Letters* **3**, 472 [5.11].

Brown, G.E., Castillejo, L., and Evans, J.A. (1961). *Nuclear Phys.* **22**, 1 [5.11].

Brueckner, K.A., and Gammel, J.L. (1958a). *Phys. Rev.* **109**, 1023 [4.7, 5.4].

Brueckner, K.A., and Gammel, J.L. (1958b). *Phys. Rev.* **109**, 1040 [4.7].

Brueckner, K.A., and Goldman, D.T. (1959). *Phys. Rev.* **116**, 424 [4.8].

Brueckner, K.A., and Levinson, C.A. (1955). *Phys. Rev.* **97**, 1344 [4.7].

Brueckner, K.A., and Masterson, K.S. (1962). *Phys. Rev.* **128**, 2267 [4.7].

Brueckner, K.A., and Sawada, K. (1957). *Phys. Rev.* **106**, (1117) and 1128 [9.2].

Brueckner, K.A., and Wada, W. (1956). *Phys. Rev.* **103**, 1008 [4.7].

Brueckner, K.A., and Watson, K.M. (1953). *Phys. Rev.* **92**, 1023 [4.7].

Brueckner, K.A., Levinson, C.A., and Mahmoud, H.M. (1954). *Phys. Rev.* **95**, 217 [4.7].

Brueckner, K.A., Eden, R.J., and Francis, N.C. (1955). *Phys. Rev.* **98**, 1445 [4.7].

Brueckner, K.A., Gammel, J.L., and Weitzner, H. (1958). *Phys. Rev.* **110**, 431 [4.8].

Brueckner, K.A., Gammel, J.L., and Kubis, J.T. (1960a). *Phys. Rev.* **118**, 1438 [4.8, 5.4].

Brueckner, K.A., Soda, T., Anderson, P.W., and Morel, P. (1960b). *Phys. Rev.* **118**, 1442 [6.8].

Brueckner, K.A., Lockett, A.M., and Rotenberg, M. (1961). *Phys. Rev.* **121**, 255 [4.8].

Chen, C. (1959). *Doklady Akad. Nauk* (S.S.S.R.) **125**, 1238: translation in: *Soviet Phys. Doklady* **4**, 413 [8.6].

Dabrowski, J. (1958). *Bull. acad. polon. sci.* (*Classe III*) **6**, 635 [3.7].

Deaver, B.S., and Fairbank, W.M. (1961), *Phys. Rev. Letters* **7**, 43 [6.3].

Debye, P., and Hückel, E. (1923). *Physik. Z.* **24**, 185 [8.4, 8.5].

De Dominicis, C.T. (1957). University of Birmingham Ph. D. thesis (unpublished) [4.9].

De-Shalit, A., and Weisskopf, V. F. (1958). *Ann. Physics* **5**, 282 [4.7]

Dirac, P.A.M. (1930). *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **26**, 376 [2.4, 5.10].

Doll, R., and Fäbauer, M. (1961). *Phys. Rev. Letters* **7**, 51 [6.3].

DuBois, D.F. (1959). *Ann. Physics* **7**, 174; **8**, 24 [8.4].

Dyson, F.J. (1949a). *Phys. Rev.* **75**, 486 [4.2].

Dyson, F.J. (1949b). *Phys. Rev.* **75**, 1736 [5.3].

Dyson, F.J. (1957). *Phys. Rev.* **106**, 20 [9.2].

Eden, R.J., Emery, V.J., and Sampanthar, S. (1959). *Proc. Roy. Soc.* A**253**, 177 and 186 [4.8].

Ehrenreich, H., and Cohen, M.H. (1959). *Phys. Rev.* **115**, 786 [5.10].

Einstein, A. (1924). *Sitzber, preuss. Akad. Wiss., Physik.-math. Kl.* p. 261 [6.2].

Einstein, A. (1925). *Sitzber. preuss. Akad. Wiss., Physik.-math. Kl.* p. 3 [6.2].

Elliott, J.P., and Flowers, B.H. (1957), *Proc. Roy. Soc.* **A242**, 57 [5.11].

Elliott, J.P., and Skyrme, T.H.R. (1955). *Proc. Roy. Soc.* **A232**, 561 [2.4, 5.7].

Emery, V.J., and Sessler, A.M. (1960). *Phys. Rev.* **119**, 43 [6.8].

Emery, V.J., and Sessler, A.M. (1960b). *Phys. Rov.* **119**, 248 [6.9].

Euler, H. (1937). *Z. Physik* **105**, 553 [3.5].

Fairbank, W. M., Buckingham, M.J., and Kellers, C.F. (1958). *Proc. 5th Intern. Conf. Low Temperature Phys. & Chem.* p. 50 Univ. of Wisconsin, Madison, Wisconsin [6.2].

Fenbach, S., Serber, R., and Taylor, T.B. (1949). *Phys. Rev.* **75**, 1352 [3.8].

Ferrell, R.A. (1957). *Phys. Rev.* **107**, 1631 [5.10].

Ferrell, R.A. (1958). *Phys. Rev. Letters* **1**, 443 [8.4].

Feshbach, H., Porter, C.E., and Weisskopf, V.F. (1954). *Phys. Rev.* **96**, 448 [3.8].

Feynman, R.P. (1949). *Phys. Rev.* **76**, 769 [4.2].

Feynman, R.P. (1953). *Phys. Rev.* **91**, 1301 [9.2].

Feynman, R.P. (1954). *Phys. Rev.* **94**, 262 [9.2].

Feynman, R.P. (1955). *Phys. Rev.* **97**, 660 [9.3].

Feynman, R.P. (1957). *Revs. Modern Phys.* **29**, 205 [6.3].

Feynman, R.P., and Cohen, M. (1956). *Phys. Rev.* **102**, 1189 [9.2].

Fock, V.I. (1930). *Z. Physik* **61**, 126 [3.2].

Francis, N.C., and Watson, K.M. (1953). *Phys. Rev.* **92**, 291 [4.7].

Fröhlich, H. (1950). *Phys. Rev.* **79**, 845 [6.3 6.5, 9.3].

Galitskii, V.M., and Migdal, A.B. (1958). *Zhur. Eksp. i. Teoret. Fiz.* **34**, 139; translation in *Soviet Phys. JETP* **7**, 96 [5.2].

Gartenhaus, S., and Schwartz, C. (1957). *Phys. Rev.* **108**, 482 [2.4].

Gell-Mann, M. (1957). *Phys. Rev.* **106**, 369 [8.4].

Gell-Mann, M., and Brueckner, K.A. (1957). *Phys. Rev.* **106**, 364 [8.4].

Gillet, V. (1962). *Thesis,* University of Paris (unpublished) [5.11].

Gillet, V., and Vinn Mau, N. (1962). *Phys. Rev. Letters* **1**, 25 [5.11].

Glassgold, A.E. (1959). In "Progress in Nuclear Physics," Vol. 7, p. 123. Pergamon, London [3.8].

Goldhaber, M., and Teller, E. (1948). *Phys. Rev.* **74**, 1046 [5.7, 5.11].

Goldstone, J. (1957). *Proc. Roy. Soc.* **A239**, 267 [4.2, 4.5, 4.7].

Goldstone, J., and Gotteried, K. (1959). *Nuovo cimento* [10] **13**, 849 [5.10].

Gambás, P. (1949). "Die Statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendugen."

Springer, Vienna [3.3].

Gombás, P. (1952a). *Acta Phys. Hungarica* **1**, 329 [3.4].

Gombás, P. (1952b). *Acta Phys. Hungarica* **2**, 223 [3.4].

Gombás, P., Mágori, E., Molnár, B., and Szabó, E. (1955). *Acta Phys. Hungarica* **4**, 267 [3.4].

Gombas,P., Szepfalusy, P., and Mágori, E. (1957). *Acta. Phys. Hungarica* **7**, 223 [4.7].

Gomes, L.C., Waleck, L.D.,J and Weisskopf, V.F. (1958). *Ann. Physics* **3**, 241 [4.7].

Gorkov, L.P. (1958). *Zhur. Eksp. i Teoret. Fiz.* **34**, 735; translation in *Soviet Phys. JETP* **7**, 505 [6.7, 8.8].

Gorkov, L.P., and Pitaevskii, L.P. (1962). *Zhur. Eksp.i. Theoret. Fiz.* **42**, 600; translation in *Soviet Phys. JETP* **15**, 417 [6.8].

Green, A.E.S. (1958). *Revs. Modern Phys.* **30**, 569 [3.4].

Griffin, J.J., and Rich, M. (1960). *Phys. Rev.* **118**, 850 [5.8].

Griffin, J.J., and Wheeler, J.A. (1957). *Phys. Rev.* **108**, 311 [5.8].

Gross, E.P. (1959). *Ann. Physics* **8**, 78 [9.3].

Gross, E.P. (1960a). *Phys. Rev. Letters* **4**, 599 [3.6].

Gross, E.P. (1960b). *Nuclear Phys.* **14**, 389 [5.8].

Gross, E.P. (1960c). *Ann. Physics* **9**, 292 [9.2].

Hartree, D.R. (1928). *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **24**, 89 [3.2].

Hartree, D.R. (1957). "The Calculation of Atomic Structures." John Wiley, New York [3.2].

Hill, D.L., and Wheeler, J.A. (1953). *Phys. Rev.* **89**, 1102 [5.8].

Horstadter, R. (1956). *Revs. Modern Phys.* **28**, 214 [3.4].

Hone, D. (1962). *Phys. Rev.* **125**, 1494 [5.5].

Huang, K. (1960). *Phys. Rev.* **119**, 1129 [9.2].

Huang, K., and Yong, C.N. (1957). *Phys. Rev.* **105**, 767 [9.2].

Hubbard, J. (1957). *Proc. Roy. Soc.* **A240**, 549 [8.6].

Hubbard, J (1958). *Pryc. Roy. Soc.* **A243**, 336 [8.6].

Huby,. R. (1949). *Proc. Roy. Soc. (London)* **A62**, 62 [3.5].

Hugenholtz, N.M. (1957). *Physica* **23**, 481 [4.2, 4.4, 4.7, 5.4].

Hugenholtz, N.M., and Pines, D. (1959). *Phys. Rev.* **116**, 489 [9.2].

Hugehnholtz, N.M., and Van Hove L. (1958). *Physica* **24**, 363 [4.8].

Inglis, D.R. (1954). *Phys. Rev.* **96**, 1059 [5.8, 5.10].

Inglis, D.R. (1956). *Phys. Rev* **103**, 1786 [5.8].

Iwamoto, F., and Yamada, M. (1957). *Progr. Theoret. Phys.* (*Kyoto*) **18**, 345 [3.7].

Jastrow, R. (1955). *Phys. Rev.* **98**, 1479 [3.7].

Kadanoff, L.P., and Baym, G. (1262). "Quantum Statistical Mechanics." Benjamin, New York [8.6].

Kadanoff, L.P., and Martin, P.C. (1960). *Phys. Rev.* **124**, 670 [8.6].

Kahn, B., and Uhlenbeck, G.E. (1938). *Physcica* **5**, 399 [7.5].

Keen, P.E., Matthews, P.W., and Wilks, J. (1963). *Phys. Rev. Letters* **5**, 5 [5.6].

Kinoshita, T., and Nambu, Y. (1954). *Phys. Rev.* **94**, 598 [8.4].

Kohn, W., and Luttinger, J.M. (1960). *Phys. Rev.* **118**, 41 [7.3].

Kubo, R. (1956). *Can. J. Phys.* **34**, 1274 [8.7].

Landau, L.D (1941). *J. Phys.* (U.S.S.R.) **5**, 71 [9.2].

Landau, L.D. (1956). *Zhur. Eksp. i Teoret. Fiz.* **30**, 1058; translation in *Soviet Phys. JETP* **3**, 920 [5.5].

Landau, L.D. (1958). *Zhur. Eksp. i Teoret. Fiz.* **35**, 97; translation in *Soviet Phys. JETP* **8**, 70 [5.9].

Langer, J.S. (1962). *Phys. Rev.* **127**, 5 [8.7].

Langmuir, I., and Tonks, L. (1929). *Phys Rev.* **33** 195 [8.3].

Laquer, H.L., Sydoriak, S.G., and Roberts, T.R. (1959). *Phys. Rev.* **113**, 417 [5.6].

Lee, T.D., and Yang, C.N. (1959a). *Phys. Rev.* **113**, 1165 [7.5, 9.2].

Lee, T.D., and Yang, C.N. (1959b). *Phys. Rev.* **116**, 25 [9.2].

Lee, T.D., and Yang, C.N. (1960). *Phys. Rev.* **117**, 12, 22 and 897 [9.2].

Lee, T.D., Low, F.E., and Pines, D. (1953). *Phys. Rev.* **90**, 297 [9.3].

Lee, T.D., Huang, K., and Yang, C.N. (1957). *Phys. Rev.* **106**, 1135 [9.2].

Levinger, J.S., and Bethe, H.A. (1950). *Phys. Rev.* **78**, 115 [5.11].

Levinger, J.S., Razavy, M., Fojo, C., and Weber, N. (1960). *Phys. Rev.* **119**, 230 [4.7].

London, F. (1950). "Superfluids," Vol.1, p. 152. John Wiley, New York. [6.3].

London, F. (1938). *Phys. Rev.* **54**, 947 [6.2].

Löwdin, P.O. (1955). *Phys. Rev.* **97**, 1474 [2.2, 2.4].

Luban, M. (1962). *Phys. Rev.* **128**, 965 [9.2].

Luttinger, J.M., and Nozières, P. (1962). *Phys. Rev.* **127**, 1431 [5.5].

Luttinger, J.M., and Ward, J.C. (1960). *Phys. Rev.* **118**, 1417 [7.3].

Maki, K., and Tsuneto, T. (1962). *Prog. Theoret. Phys.* (*Kyoto*) **27**, 228 [6.7].

March N.H. (1957). *Advances in Phys.* **6**, 1 [3.3].

Masterson, K.S., and Lockett, A.M. (1963). *Phys. Rev.* **129**, 776 [4.8].

Martin, P.C., and Schwinger, J. (1959). *Phys. Rev.* **115**, 1342 [8.1, 8.6].

Matsubara, T. (1955). *Progr. Theoret. Phys.* (Kyoto) **14**, 351 [7.2, 9.2].

Maxwell, E. (1950). *Phys. Rev.* **78**, 477 [6.3].

Mayer, J. (1937). *J. Chem. Phys.* **5**, 67 [7.5].

Mayer, M.G. (1950). *Phys. Rev.* **78**, 22 [6.9].

Mayer, M.G., and Jensen, J.H.D. (1955). "Elementary Theory of Nuclear Shell Structure." Wiley, New York [3.8].

Mermin, N.D. (1962). *Annals of Phys.* **18**, 421 and 454 [3.6].

Montroll, E.W., and Ward, J.C. (1958). *Phys. Fludis* **1**, 55 [7.2, 8.3, 8.4]

Moszkowski, S.A., and Scott, .L. (1960). *Annals of Phys.* **11**, 65 [4.7].

Nozières, P. (1962). "La Problème à N Corps." Dunod, Paris [5.5].

Overhauser, A.W. (1962). *Phys. Rev.* **128**, 1437 [3.6].

Overhauser, A.W. (1960). *Phys. Rev. Letters* **4**, 415 [3.6].

Peierls, R.E. (1938). *Phys. Rev.* **54**, 918 [6.6].

Peierls, R.E., and Thouless, D.J. (1962). *Nuclear Phys.* **38**, 154 [5.8, 5.10].

Peierls, R.E., and Yoccoz, J. (1957). *Proc. Phys. Soc.* (London) **A70**, 381 [5.8].

Pekar, S.I. (1946). *J. Phys.* (U.S.S.R.) **10**, 341 [9.3].

Pines, D. (1953). *Phys. Rev.* **92**, 636. [8.3].

Pines, D. (1958). *Phys. Rev.* **109**, 280 [6.5].

Prange, R.E., and Klein, A.B. (1958). *Phys. Rev.* **112**, 994 [5.3].

Racah, G. (1949). *Phys. Rev.* **76**, 1352 [6.4].

Rajaraman, R. (1963). *Phys. Rev.* **129**, 265 [4.7].

Razavy, M. (1963). *Phys. Rev.* **130**, 1091 [4.7].

Reynolds, C.A., Serin, B., Wright W.H., and Nesbitt, L.B. (1950). *Phys. Rev.* [6.3].

Ripka, G. (1963). *Nuclear Phys.* **42**, 75 [5.4].

Sachs, R.G., and Austern, N. (1951). *Phys. Rev.* **81**, 705 [5.11].

Schafroth, M.R. (1954). *Phys. Rev.* **96**, 1442 [6.3].

Salpeter, E.E. (1958). *Ann. Physics* **5**, 183 [7.5].

Sawada, K. (1957). *Phys. Rev.* **106**, 372 [8.4, 8.6, 9.3].

Sawada, K., Brueckner, K.A., Fukuda, N., and Brout, R. (1957). *Phys. Rev.* **108**, 507 [8.3, 8.4]

Schultz, T.D. (1958). *Nuovo cimento* [10] **8**, 943 [6.6].

Serin, B. (1956). In "Handbuch der Physik," Vol. XV, pp. 217-73. Springer, Berlin [6.3].

Shaw, G.L. (1959). *Ann. Physics* **8**, 509 [5.4].

Skyrme, T.H.R. (1959). *Nuclear Phys.* **9**, 615 [5.11].

Swiatecki, W.J. (1951) *Proc. Phys. Soc. (London)* **A64**, 226 [3.4].

Swiatecki, W.J. (1956). *Phys. Rev.* **103**, 265 [4.7].

Swiatecki, W.J. (1957). Proceedings of the Pittsburgh Conference on Nuclear Structure, pp. 173-88. (unpublished) [3.4].

Temmer, G.M. (1958). *Revs. Modern Phys.* **30**, 498 [3.8].

Thouless, D.J. (1957). *Phys. Rev.* **107**, 559 [4.7].

Thouless, D.J. (1958). *Phys. Rev.* **112**, 906 [4.7, 4.8].

Thouless, D.J. (1959). *Phys. Rev.* **114**, 1383 [5.3, 5.4].

Thouless, D.J. (1960). *Phys. Rev.* **117**, 1256 [6.4].

Thouless, D.J. (1960a). *Nuclear Phys.* **21**, 225 [5.10].

Thouless, D.J. (1961). *Nuclear Phys.* **22**, 78 [5.10].

Thouless, D.J., and Valatin, J.G. (1962). *Nuclear Phys.* **31**, 211 [5.10].

Tomonaga, S. (1955a). *Progr. Theoret. Phys. (Kyoto)* **13**, 467 [5.7].

Tomonaga, S. (1955b). *Progr. Theoret. Phys. (Kyoto)* **13**, 482 [8.6].

Vaks, V,G., Galitskii, V.M., and Larkin, A.I. (1960). *Zhur. Eksp. i Teoret Fiz.* **41**, 1655; translation in *Soviet Phys. JETP* **14**, 1177 [8.8].

Valatin, J.G. (1958). *Nuovo cimento* [10] **7**, 843 [6.7].

Valatin, J.G., and Butler, D. (1958). *Nuovo cimento* [10] **10**, 37 [9.2]

Valatin, J.G. (1961). *Phys. Rev.* **122**, 1012 [6.7, 8.8].

Van Hove, L. (1960). *Physcia* **26**, S 200 [4.4].

Wada, Y., Takano,F ., and Fukuda, N. (1958). *Progr. Theoret. Phys. (Kyoto)* **19**, 597 [6.4, 6.5].

Watson, K.M. (1953). *Phys. Rev.* **89**, 575 [4.7].

Watson, K.M. (1957). *Phys. Rev.* **105**, 1388 [4.7].

Wick, G.C. (1950). *Phys. Rev.* **80**, 268 [4.3].

Wigner, E.P. (1934). *Phys. Rev.* **46**, 1002 [8.4].

Wilets, L. (1958). *Revs. Modern Phys.* **30**, 542 [3.4].

Wilkinson, D.H. (1956). *Physica* **22**, 1039 [5.11].

Yang, C. (1962). *Revs. Modern Phys.* **34**, 694 [6.7].

Yoccoz, J. (1957). *Proc. Phys. Soc. (London)* **A70**, 388]5.8].

Zyrianov, P.S., and Eleonskii, V.M. (1956). *Zhur. Eksp. i Teoret. Fiz.* **30** 592; translation in *Soviet Phys. JETP* **3**, 620 [5.10].

索 引

Thouless, D.J.; the Quantum Mechanics of Many-Body Systems.

1965年 8 月15日　第1刷発行　　　　¥ 900

訳　者　　　　　　　　　　　　　　松　原　武　生
　　　　　　　　　　　　　　　　　米　沢　富　美　子

発　行　京都市左京区田中門前町　株式会社　吉　岡　書　店
　　　　　　　　　　　　　　　　　　　　吉　岡　　清

発　売　東京都中央区日本橋　　丸善株式会社

天業社・日本紙興

物理学叢書

A・5判／上製本ケース入／各巻　250頁～500頁

編集：小谷正雄／小林稔／井上健／山本常信／高木修二

―第3期―

21・22巻	ドーデル他著 大鹿　譲他訳	量子化学　上/下	上 ¥1,300 下 ¥1,300
23・24巻	アイリング著 長谷川・平井・後藤訳	絶対反応速度論　上/下	上 ¥1,500 下 ¥1,500
25・27巻	アブラガム著 富田・田中訳	核の磁性　上/下	上 ¥1,500 下 11月刊
26巻	サウレス著 松原・米沢訳	多体系の量子力学	¥900
28巻	ボンチーブルウヴィッチ・チャブリコフ著 久保亮五他訳	統計力学における　グリーン函数の方法	続刊
29巻	ロッシ著 福田・中井・加藤訳	光学	〃
30巻	フント著 犬井鉄郎訳	物質構造論	〃

―1.2期完結―

―1期

- フェルミ　原子核物理学　―小林稔他訳 ¥1,800
- シッフ　量子力学上　―井上　健訳 ¥1,200
- ガーネイ　統計力学序論　―山本常信訳 ¥1,300
- ショックレイ　半導体物理学上　―川村肇訳 ¥1,800
- ハイトラー　輻射の量子論上　―沢田克郎訳 ¥1,300
- パイエルス　固体の量子論　―碓井恒丸他訳 ¥1,300
- ハイトラー　輻射の量子論下　―沢田克郎訳¥1,100
- ショックレイ　半導体物理学下　―川村肇訳 ¥1,100
- シッフ　量子力学下　―井上健訳 ¥1,100
- ブアン・ブレック　物質の電気分極と磁性　―小谷・神戸訳 ¥2,000

―2期

- ゴールドスタイン　古典力学　―野間・瀬川訳特¥2,200/並¥1,700
- バチエラー　乱流理論　―巽　友正訳 ¥1,000
- オッペンハイマー　電気力学　―小林　稔訳 ¥1,000
- ランダウ・スモロディンスキー　原子核理論　―高木・天井訳 ¥900
- リープマン・ロシュコ　気体力学　―玉田珖訳特¥2,200/並¥1,700
- フレーリッヒ　誘電体論　―永宮・中井訳 ¥1,000
- モット・マッセイ　衝突の理論上　―高柳和夫訳 ¥1,200
- モット・マッセイ　衝突の理論下　―高柳和夫訳 ¥1,400
- パノフスキー　電磁気学上　―林・西田訳 ¥1,200
- パノフスキー　電磁気学下　―林・天野訳¥1,100